

Messung der
Depolarisationswirkungsquerschnitte
bei Stößen zwischen
orientierten Rubidiumatomen im niedrigsten
P- Dublett und Edelgasatomen im Grundzustand
bei verschiedenen Temperaturen mit der
Methode der Fluoreszenzlichtbeobachtung
im hohen Magnetfeld

INAUGURAL-DISSERTATION
zur
Erlangung der Doktorwürde
des
Fachbereichs Physik
der Philipps-Universität Marburg/Lahn

Vorgelegt von
A. Barbara Kamke
aus Berlin

Marburg/Lahn 1977



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41552327_0016

Messung der
Depolarisationswirkungsquerschnitte
bei Stößen zwischen
orientierten Rubidiumatomen im niedrigsten
P- Dublett und Edelgasatomen im Grundzustand
bei verschiedenen Temperaturen mit der
Methode der Fluoreszenzlichtbeobachtung
im hohen Magnetfeld

INAUGURAL-DISSERTATION
zur
Erlangung der Doktorwürde
des
Fachbereichs Physik
der Philipps-Universität Marburg/Lahn

Vorgelegt von
A. Barbara Kamke
aus Berlin

Marburg/Lahn 1977



Vom Fachbereich Physik der Philipps-Universität Marburg/Lahn als

Dissertation angenommen am 14. April 1977

Tag der mündlichen Prüfung am 20. April 1977

Berichterstatter: Prof. Dr. M. Elbel

Mitherichterstatter: Prof. Dr. S. Großmann

Inhaltsverzeichnis

	Seite
Einleitung	1
<u>Teil I. Überblick, Theorie, Meßmethode</u>	3
1. Überblick über die optisch meßbaren Phänomene beim Stoß von angeregten Alkaliatomen mit Edelgasatomen	3
2. Zur Theorie depolarisierender Stöße	8
2.1 Molekülterme (Energienmatrix) des Quasimoleküls Rubidium - Edelgas	8
2.2 Prinzip der Depolarisation, Einhaltepunktmodell	14
2.3 Depolarisation des $2P_{1/2}$ - Zustands, halbklassische Theorie nach /36/, /44/2	16
3. Das Meßverfahren	22
3.1 Zusammenhang zwischen Tensorpolarisationen und den verschiedenen Fluoreszenzlichtkomponenten	22
3.2 Prinzip des Versuchsaufbaus	25
3.3 Bilanzgleichungen, Auswertungsverfahren	27
3.4 Einfluß des Kernspins	30
3.5 Vorteile der Meßmethode	32
<u>Teil II. Messungen von $\sigma_{1/2}^{(1)}$ und $\sigma_{3/2}^{(1)}$ bei 44°C für He, Ne, Ar, Kr und Xe</u>	34
1. Der Versuchsaufbau	34
1.1 Bestandteile der Apparatur	35
1.1.1 Die Rubidium - Spektrallampe	35
1.1.2 Der Chopper	37
1.1.3 Interferenzfilter	37
1.1.4 Die Zirkularpolarisatoren	38
1.1.5 Photomultiplier und Lichtleiter	39
1.1.6 Magnetfeld	40
1.1.7 Resonanzzelle, Ofen, Vakuumapparatur	41
1.2 Zusammenbau und Justierung der Apparatur, vorbereitende Messungen	43
1.2.1 Strahlengang und Einfluß von Reflexen auf die Messungen	43

	Seite
1.2.2 Festlegung der Seitenarmtemperatur	46
1.2.3 Statistischer Fehler	47
1.2.4 Symmetriekontrolle des Zirkularanalysators	48
1.2.5 Sensibilisiertes Fluoreszenzlicht?	48
1.2.6 Einfluß durch optisches Pumpen	49
1.2.7 Einfluß durch den Einlauf von Stickstoff während der Messung	49
2. Meßkurven und Meßgeraden	51
3. Ergebnisse und Diskussion	56
4. Zusammenfassung des II. Teils	60

<u>Teil III. Messung der Temperaturabhängigkeit der</u> <u>Depolarisationswirkungsquerschnitte im Bereich</u> <u>310K bis 720 K, Berechnung von $\sigma^{(1)}$ im Bereich</u> <u>10 K bis 1000 K</u>	1/2	61
--	-----	----

1. Sinn der Messungen, theoretischer Hintergrund	61
1.1 Energieabhängigkeit der Depolarisationsquerschnitte im $^2P_{3/2}$ - Zustand, einfaches Modell	62
1.2 Energieabhängigkeit des Wirkungsquerschnitts $\sigma^{(1)}$ 1/2	63
1.2.1 Rubidium - Helium, einfaches Modell	63
1.2.2 $\sigma^{(1)}_{1/2}(\omega)$ mit der halbklassischen Theorie aus Kap. I 2.3	65
1.2.2.1 $\sigma^{(1)}_{1/2}(\omega)$ für Rubidium - Helium, abstoßendes Potential	66
1.2.2.2 $\sigma^{(1)}_{1/2}(\omega)$ für Rubidium - Krypton und Rubidium - Xenon, teilweise anziehende Potentiale	71
2. Der Versuchsaufbau	79
2.1 Die Resonanzzelle	80
2.2 Der Ofen	81
2.3 Einfluß der Wärmestrahlung	82
2.4 Testmessungen	83
3. Meßergebnisse, Diskussion	84
3.1 Helium	84
3.2 Krypton und Xenon	86
4. Zusammenfassung des III. Teils	87

<u>Teil IV. Ausblick, Messung bei niedrigen Temperaturen</u>	89
<u>Literaturverzeichnis</u>	94

Einleitung

In den letzten 10 - 15 Jahren wuchs das Interesse an der Untersuchung bestimmter Phänomene, die in angeregten Zuständen von Atomen im Stoß mit anderen Atomen oder Molekülen auftreten. Zahlreiche theoretische und experimentelle Arbeiten sind in dieser Zeit über solche Themen erschienen. Einen Überblick geben u.a. die Artikel von Happer /1/, Nikitin /2/, Elbel /3/ und Lijnse /74/. Der Vergleich zwischen Theorie und Experiment kann Aufschluß geben über die Stoßmechanismen und über die während des Stoßes wirksamen Potentiale. "Konventionelle" Streuver-
suche werden bei solchen Problemen versagen, da die Zustände - insbesondere wenn es sich um Resonanzniveaus handelt - sehr kurzlebig sind ($\tau \approx 10^{-8}$ s). Hier bieten sich optische Nachweismethoden an, da die Eigenschaften des Fluoreszenzlichtes, das die gestreuten Atome aussenden (Intensität, Polarisation), Aufschluß geben über die Besetzung eines Niveaus oder darüber, ob und wie eventuell vorhandene Unterniveaus (Zeemanniveaus) verschieden besetzt sind, und wie sich diese Besetzung durch den Stoß ändert.

Wegen der Kompliziertheit der Stoßvorgänge sind theoretische Vorhersagen mit guter Genauigkeit nur für einfache Systeme möglich, und auch dort ist es nötig, vereinfachende Modelle zu benutzen. So wurde häufig das sehr einfache System Quecksilber - Edelgas untersucht (z.B. /75/). Ebenso einfach ist das System eines Alkaliatoms im niedrigsten angeregten Zustand und eines Edelgasatoms im Grundzustand. Eine Vielzahl von Arbeiten behandelt deshalb dieses Problem (Referenzen werden im Lauf der Arbeit angegeben) oder auch das des elektronisch gleichen Systems einfach ionisiertes Erdalkaliatom und Edelgasatom (z.B. /4,5/).

Bei den Alkalimetallen hat man die mit kleiner Feinstrukturaufspaltung (Lithium, Natrium) und die mit großer Feinstrukturaufspaltung (Rubidium, Cäsium) unterschiedlich zu behandeln, da im einen Fall eine Vermischung der Zustände $^2P_{1/2}$ und $^2P_{3/2}$ zu berücksichtigen ist (niedrigstes P - Dublett), im anderen Fall beide Zustände in guter Näherung als isoliert betrachtet werden können. Dies hat insbesondere wesentliche Konsequenzen für die Depolarisation des $^2P_{1/2}$ - Zustands.

An Natrium (4^2P) - Edelgasstößen hat Schneider /6/ in seiner Dissertation ausführlich gearbeitet (Veröffentlichungen /10,67/). Daneben behandeln z.B.

auch die Referenzen /7, 8, 9, 18, 19/ sowie zahlreiche theoretische Arbeiten vor allem von Elbel (z.B. /11, 12, 34/), von einer Gruppe in Paris (Masnou et.al. z.B. /13/) und von Nikitin und Mitarbeitern (z.B. /36, 37/), die hier im Einzelnen nicht alle aufgeführt werden können, das Problem.

An Kalium und Cäsium arbeitet vor allem die Gruppe Krause et.al. in Windsor, Kanada, /28, 76 /, und die Arbeiten von Gallagher /14, 15/ behandeln neben Rubidium auch Cäsium.

Über Rubidium gibt es ebenfalls bereits zahlreiche experimentelle und theoretische Veröffentlichungen. Messungen von Gallagher /14/, Zhitnikov et.al. /16/, Papp und Franz /31/ benutzen Meßverfahren, die eine theoretische Interpretation der erhaltenen Werte erforderlich machen und somit nicht unabhängig vom benutzten Stoßmodell sind.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit Rubidium - Edelgas Stößen, wobei die Rubidiumatome im 5^2P - Niveau, die Edelgasatome im Grundzustand sind. Die Wirkungsquerschnitte für Depolarisation werden gemessen. Durch ein hinreichend hohes Magnetfeld wird der Kernspin vom Hüllenspin abgekoppelt. Dadurch werden die Meßergebnisse frei von theoretischen Vorhersagen und lassen sich somit zur Prüfung der Stoßmodelle verwenden im Gegensatz zu den in /14, 16, 31/ vorgestellten Messungen.

Im nächsten Kapitel wird ein kurzer Überblick über die bei den Alkali - Edelgasstößen optisch beobachtbaren Phänomene gegeben. Dort wird auch das Ziel der vorliegenden Arbeit noch genauer umrissen.

Teil I. Überblick, Theorie, Meßmethode

1. Überblick über die optisch meßbaren Phänomene beim Stoß von angeregten Alkaliatomen mit Edelgasatomen

Bei allen Messungen wird zunächst der Alkalidampf auf eine bestimmte Weise präpariert, nämlich so, daß die insgesamt sechs Zeemanterme des ersten angeregten Zustands auf optischem Wege ungleich besetzt werden. Abb. 1 zeigt die relativen Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen dem Grundzustand und den in Frage kommenden Zeemantermen des angeregten Zustands. Daraus wird deutlich, wie man eine Ungleichbesetzung erreichen kann.

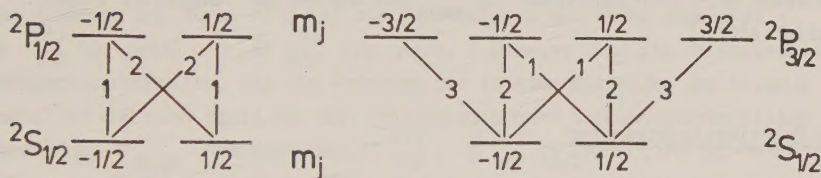


Abb. 1 : Relative optische Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den Zeemanzuständen des Grundzustands und des ersten angeregten Zustands eines Alkaliatoms.

a) Sensibilisierte Fluoreszenz

Beim Rubidium ist die Feinstrukturaufspaltung groß (verglichen mit thermischen Energien). Die D_1 - und D_2 -Linien unterscheiden sich um $148 \text{ \AA}$ (Natrium $6 \text{ \AA}$) und lassen sich mit Hilfe von Interferenzfiltern leicht trennen. Die einfachste Möglichkeit, eine Ungleichbesetzung im $2P$ -Niveau zu erzeugen, wäre also, z.B. nur D_1 -Licht einzustrahlen. Dann werden nur die Terme mit $j=1/2$ besetzt. Man kann dann untersuchen, ob im Fluoreszenzlicht D_2 -Lichtquanten vorhanden sind, wenn der so präparierte Dampf Stößen mit Edelgasatomen unterworfen wird. Das heißt, man mißt, ob durch den Stoß ein Übergang von $j=1/2$ nach $j=3/2$ stattfindet. Diese Stöße nennt man sensibilisierende Stöße und kürzt den zugehörigen Wirkungsquerschnitt mit σ_{sens} ab. (Umgekehrt kann man natürlich genauso

den Übergang von $j=3/2$ nach $j=1/2$ messen). In /15/ ist σ_{sens} für Rubidium und Cäsium in Abhängigkeit von der Temperatur gemessen worden. Schneider /6/ hat σ_{sens} für Natrium gemessen.

Es ist zu erwarten, daß die Stoßübergangsquerschnitte $j=1/2$ nach $j=3/2$ um so kleiner sind je größer die Energiedifferenz zwischen den betroffenen Niveaus ist. Dies ist auch aus der in der Arbeit von Cuvellier et. al. /20/ angegebenen Tabelle III deutlich zu sehen, in der die Meßergebnisse von /15/ (Rb, Cs) sowohl mit Werten für Kalium und Natrium /21/ als auch mit Messungen von Pimbert /22/ und Siara et.al. /23/ mit höher angeregtem Cäsium (8^2P) und Rubidium (6^2P) verglichen werden. Weiter sieht man dort aus den Messungen aus /15/ auch deutlich, daß die $j=1/2 \rightarrow j=3/2$ Übergangswirkungsquerschnitte vom Helium zum Krypton hin monoton abfallen und sich dann zum Xenon hin nicht mehr wesentlich ändern. Daraus kann man folgern, daß auf Grund der Energieaufspaltung σ_{sens} umso größer ist je größer die Relativgeschwindigkeit der Stoßpartner ist. Dies zeigt sich auch darin, daß σ_{sens} mit steigender Temperatur stark ansteigt /15/.

b) Polarisationstransfer

Wiederum strahlt man nur D_1 - Lichtquanten ein. Diesmal aber zirkular polarisiert. Dadurch wird z.B. nur der Term mit $j=1/2$, $m_j=+1/2$ besetzt (siehe Abb. 1). Entsprechend wird polarisiertes Fluoreszenzlicht abgestrahlt. Man kann nun messen, ob bei Zugabe von Edelgas das sensibilisierte D_2 - Fluoreszenzlicht ebenfalls polarisiert ist, ob also beim Stoß Polarisation übertragen wird. Den zugehörigen Wirkungsquerschnitt nennt man dementsprechend σ_{poltrans} . σ_{poltrans} wurde von Schneider /6,10,67/ am Natrium gemessen. Für Kalium wurde er von Niewitecka und Krause /72/ gemessen. Soweit uns bekannt ist, wurde er für die schweren Alkali bisher nicht gemessen. Gelbhaar /24/ hat den Polarisationsübertrag beim stoßinduzierten Übergang $6^2P_{3/2} \rightarrow 6^2D_{5/2}$ bei Thallium - Edelgas Stößen gemessen.

c) Depolarisation

Der Alkalidampf wird auf die gleiche Weise präpariert wie im Fall (b), also mit zirkular polarisiertem D_1 - Licht. Nun untersucht man die Polarisation des abgestrahlten D_1 - Fluoreszenzlichtes. Da Stöße die Tendenz haben, eine Gleichbesetzung der Zeemanterme herbeizuführen, wird bei Zugabe von Edelgas auch der andere Zeemanzustand ($m_j = -1/2$) besetzt. Dies führt zur Abnahme der Polarisation des Fluoreszenzlichtes. Natürlich kann man diese Messungen auch mit D_2 - Licht machen. Dort werden zunächst nur die Terme mit positiven m_j optisch besetzt. Durch die Stöße werden dann auch die mit negativen m_j besetzt, was - wie bei D_1 - zum Auftreten von σ^- - Lichtquanten im Fluoreszenzlicht führt. Da es sich bei der auf die beschriebene Weise erzeugten Polarisation um eine Dipolpolarisation handelt, d.h. eine Polarisation vom Grade 1, nennen wir die zugehörigen Wirkungsquerschnitte in Anlehnung an die Tensorschreibweise - eingeführt von Fano /25/ und wegen der Isotropie der Stoßphänomene von Omont /26/ und Dyakonov und Perel /27/ auf die Beschreibung der Stöße angewandt - $\sigma_{1/2}^{(1)}$ für $j=1/2$ und $\sigma_{3/2}^{(1)}$ für $j=3/2$. (Gemeint sind die "makroskopischen" Wirkungsquerschnitte, die die Änderung der totalen Besetzung des Niveaus enthalten und sich somit von den "mikroskopischen" Wirkungsquerschnitten gerade um $\sigma_{\text{sens}}^{(8)}$ unterscheiden. $\sigma_{1/2}^{(1)} = \sigma_{1/2 \rightarrow 3/2}^{(0)} + 2 \cdot \sigma_{(1/2 \ 1/2 \rightarrow 1/2 \ -1/2)}$. $\sigma_{\text{sens}} = \sigma_{1/2 \rightarrow 3/2}^{(8)}$. Siehe /18/. Da bei den schweren Alkali die Wirkungsquerschnitte für sensibilisierende Stöße um mehrere Zehnerpotenzen kleiner sind als die Depolarisationsquerschnitte, spielt der Unterschied in diesem Fall kaum eine Rolle)

Diese Wirkungsquerschnitte sind für alle Alkalimetalle Natrium bis Cäsium auf verschiedene Weise gemessen worden. Wegen der Vielzahl der Arbeiten können hier nur einige angegeben werden. So wurden $\sigma_{1/2}^{(1)}$ und $\sigma_{3/2}^{(1)}$ in /29,33,38,6/ mit der Methode des optischen Pumpens (D_1 und D_2) für Natrium - Edelgasstöße gemessen, in /30,31,16/ mit derselben Methode für Rubidium. Aus der Verbreiterung von Hanlekurven wurden diese Wirkungsquerschnitte in /32/ für Natrium und in /14/ für Rubidium und Cäsium gemessen. Für Kalium und Cäsium wurden die Messungen in Windsor, Kanada, mit der Methode des Zeemanscanning durchgeführt /28/.

d) Disalignment

Schallt man linear polarisiertes D_2 - Licht ein, so werden die Terme mit $m_j = \pm 3/2$ gegenüber denen mit $m_j = \pm 1/2$ bevorzugt besetzt (Abb.1). Dies ist in /7/ ausführlich beschrieben. Dadurch wird eine Polarisation vom Grade 2, ein "alignment" (Quadrupolpolarisation) erzeugt. Dieses alignment wird durch die Stöße mit Edelgasatomen verkleinert. Den zugehörigen Wirkungsquerschnitt nennen wir $\sigma_{3/2}^{(2)}$. Er wurde für Natrium und Rubidium in /7/ gemessen und in /18/ und /39/ veröffentlicht.

e) Sonstiges

Neben Dipol - und Quadrupolpolarisation kann im $j=3/2$ - Zustand wegen $2j = 3$ auch eine Oktupolpolarisation (Grad 3) aufgebaut werden. Dies ist aber optisch nicht möglich, da mit Licht wegen des Photonenspins 1 höchstens Polarisationen bis zum Grade 2 erzeugt und nachgewiesen werden können. $\sigma_{3/2}^{(3)}$ ist also mit den bisher erwähnten Methoden nicht meßbar. Die Entwicklung schmalbandiger durchstimmbarer Laser und die Möglichkeit, mit supraleitenden Spulen sehr hohe Magnetfelder (5 - 10 Tesla) zu erzeugen, machen es möglich, alle bisher erwähnten Wirkungsquerschnitte und auch $\sigma_{3/2}^{(3)}$ aus der Messung zu berechnen. Sind nämlich die Zeemanniveaus im hohen Magnetfeld hinreichend weit aufgespalten, kann man mit dem Laser selektiv ein Zeemanniveau anregen und nun mit Hilfe eines hochauflösenden Spektralapparats (Fabry Perot. Interferometer) das Fluoreszenzlicht beobachten, das von genau einem der Niveaus abgestrahlt wird. So kann man alle Übergangswirkungsquerschnitte $\sigma(j m_j \rightarrow j' m_j')$ zwischen den Zeemantermen des angeregten Zustands direkt messen und daraus alle in (a) - (d) erwähnten Wirkungsquerschnitte berechnen. Diese Messungen sind bisher nur am Natrium von Gay und Schneider /8/ durchgeführt worden.

Alle bisher erwähnten Effekte kann man natürlich auch in höher angeregten Termen, z.B. D - Termen messen. Auch darüber gibt es schon einige Veröffentlichungen. Hier seien als Beispiel nur die Referenzen /24/ (Thallium - Edelgas, Polarisationstransfer $6^2P_{3/2} \rightarrow 6^2D_{5/2}$), /20/ (Cäsium - Edelgas, Übergänge von $7^2P_{1/2} \rightarrow 6^2D_{3/2}$, $7^2P_{3/2} \rightarrow 6^2D_{3/2}$) und die dort erwähnten Referenzen (z.B. /22,23/) angeführt.

Ein großes Forschungsgebiet, das mit dem bis jetzt erwähnten eng verwandt ist und auch in theoretischen Arbeiten oft gleichzeitig behandelt wird, ist die Verbreiterung und Verschiebung der Spektrallinien bei Zugabe von Edelgasen von einigen 100 mb Druck. Von den theoretischen Arbeiten sei hier als Beispiel nur die von Lewis und Mc Namara /40/ und die von Cooper /41/ erwähnt. Auch die Gruppe in Paris (Masnou, Roueff) beschäftigt sich mit diesem Problem. Aus der Untersuchung der Form der von einem Alkali - Edelgasgemisch ausgestrahlten Spektrallinien kann man insbesondere experimentelle Aussagen über Potentialdaten bekommen. Erwähnt sei in diesem Zusammenhang als Beispiel die Gewinnung von Rubidium - Edelgas Potentialdaten aus der Beobachtung der "far wings" also der Linien - flanken des ausgestrahlten Fluoreszenzlichtes bei 400 Torr Edelgas durch Drummond und Gallagher /42/.

Neue Untersuchungsmöglichkeiten bieten sich durch die Benutzung schmal - bandiger Laser an. Dadurch ist es u.a. möglich, Atome mit nur einer bestimmten Geschwindigkeitskomponente bezüglich des eingestrahlten Lichts anzuregen, also eine Art Atomstrahl zu erzeugen. Die Messungen in /19/ und /9/ nutzen diese Möglichkeit aus.

Die in (a) und (b) eingeführten Wirkungsquerschnitte σ_{sens} und σ_{poltrans} sind bei den schweren Alkali wegen der großen Feinstruktur - aufspaltung ($\Delta E \gg kT$) klein verglichen mit den Wirkungsquerschnitten $\sigma_j^{(k)}$, $j = 1/2, 3/2, k = 1, 2, (3)$. σ_{sens} für Rb - Ne Stöße ist z.B. bei $T = 450 \text{ K}$ $4 \cdot 10^{-3} \text{ Å}^2$, für Rb - He etwa 10^{-1} Å^2 /15/. $\sigma_{1/2}^{(1)}$ ist dagegen für Neon etwa 19 Å^2 , für Helium ca. 33 Å^2 . $\sigma_{3/2}^{(1)}$ ist dagegen für beide Gase über 100 Å^2 groß (genaue Werte im Lauf der Arbeit). Der Stoßübergang $2P_{1/2} \rightarrow 2P_{3/2}$ soll deshalb im Folgenden vernachlässigt werden. Theoretische Arbeiten über schwere Alkali betrachten die $2P$ - Niveaus als isoliert im Bereich thermischer Energien $T \leq 1000 \text{ K}$.

In der vorliegenden Arbeit werden $\sigma_{1/2}^{(1)}$ und $\sigma_{3/2}^{(1)}$ für Rubidium im Stoß mit He, Ne, Ar, Kr und Xe zunächst bei ca. 44°C gemessen. Zusammen mit den Werten $\sigma_{3/2}^{(2)}$ aus /7/ sind damit alle optisch meßbaren Wirkungsquerschnitte im niedrigsten P - Dublett des Rubidium mit ein und derselben Meßmethode in unserer Arbeitsgruppe gemessen worden (mit Ausnahme von σ_{sens} und σ_{poltrans}) und können zum Vergleich mit theoretischen Vorhersagen herangezogen werden. Außerdem wird die Temperatur - abhängigkeit dieser Wirkungsquerschnitte im Bereich $40^\circ \text{C} \rightarrow 450^\circ \text{C}$ gemessen. Mit Ausnahme der Messungen $\sigma_{\text{sens}}(T)$ in /15/ und der Messung an Natrium /9/

sind dies, soweit uns bekannt ist, die ersten Messungen der Depolarisationswirkungsquerschnitte bei verschiedenen Temperaturen. Größe und Temperaturabhängigkeit ergeben zusammen einen recht guten Test für die Anwendbarkeit einer bestimmten Theorie und berechneter Potentiale.

2. Zur Theorie depolarisierender Stöße

Es soll im folgenden keine formale theoretische Beschreibung des Stoßvorganges - etwa mit Hilfe der Streumatrix etc. - gegeben werden, sondern eine mehr anschauliche Deutung an Hand eines einfachen Stoßmodells. (Eine gute Gegenüberstellung verschiedener theoretischer Behandlungen - weisen gibt ein Artikel von Nikitin /43/. In /36/ ist beschrieben, wie man mit Hilfe der Streumatrix die Stoßübergangsquerschnitte zwischen den Zeemanniveaus bekommt.) Allerdings soll speziell für den $^2P_{1/2}$ - Zustand eine halbklassische Theorie genauer dargestellt werden, da wir diese zur Berechnung von $\sigma_{1/2}^{(1)}$ verwendet haben.

2.1 Molekülterme (Energiematrix) des Quasimoleküls Rubidium - Edelgas

Abb. 2 zeigt zunächst einmal, wie die Terme im Quasimolekül Rb - Edelgas (hier etwa Helium) schematisch aussehen.

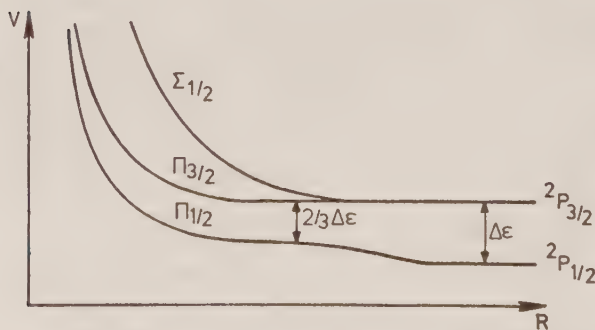


Abb.2: Rb - Edelgas (He) Potentialkurven. Schematisch

Formal bekommt man diese Zustände durch die Berechnung der Energiematrix des Systems:

Der Hamiltonoperator lautet:

$$H = H_A + H_B + W + V$$

H_A, H_B : Elektrostatische Hamiltonoperatoren der getrennten Atome A und B für $R \rightarrow \infty$. Symmetrisch um die Zentren der Atome. Invariant gegen Drehungen um die internukleare Achse und gegen Spiegelung an der Streuebene.

$W = A \cdot \vec{L} \cdot \vec{S}$: Spin - Bahn Wechselwirkung des Alkaliatoms. Kommutiert mit J, J_z .

V : Wechselwirkung zwischen den Stoßpartnern. V wird in den theoretischen Arbeiten auf verschiedene Weise beschrieben. Hier sei zunächst nur die generelle Wirkung von V auf die Terme während des Stoßes betrachtet. V ist zylindersymmetrisch um die Kernverbindungsachse und deshalb invariant gegen Drehungen um diese Achse. V wirkt nicht auf den Spin.

Als Basis bieten sich, da bei den schweren Alkali - wie bereits erwähnt - j gute Quantenzahl bleibt, die Eigenfunktionen zu J^2 und J_z an.

Als z - Achse des Koordinatensystems wählen wir der Einfachheit halber die Kernverbindungsachse und nennen die zugehörigen Basisvektoren $|j M\rangle_z$.

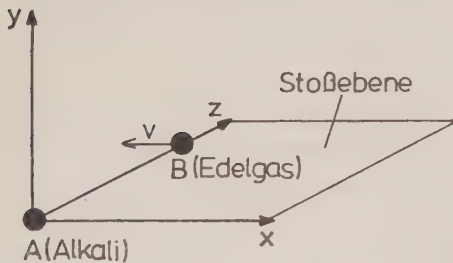


Abb.3: Koordinatensystem zur Berechnung der Energiematrix.
z - Achse = Kernverbindungsachse.

Bezüglich der Kernverbindungsachse läßt sich die Wirkung von V besonders einfach beschreiben. Da V nicht auf den Spin wirkt, nehmen wir zunächst die Basis $|L M\rangle_z$. Ein Alkaliatom im Zustand $L=1$ hat die in Abb.4 dargestellten Orientierungsmöglichkeiten der Elektronenwolke bezüglich der Quantisierungsachse.

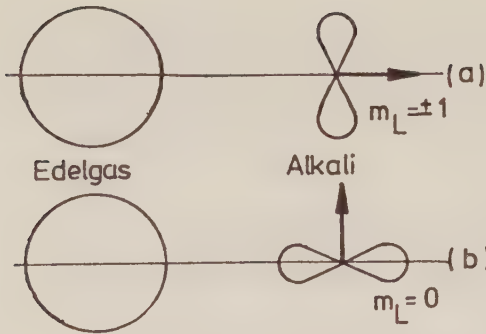


Abb.4: Mögliche Einstellung des Elektronendrehimpulses $L=1$ (bzw. der zugehörigen Elektronenverteilung) entlang der Quantisierungsachse.

In (a) ist der Zustand mit $M_L = \pm 1$ dargestellt. Das zwischen diesem Zustand und dem Edelgas herrschende Potential nennen wir V_π ($\Lambda = 1$). Man sieht in Abb.4, daß sich in diesem Fall die Atome sehr weit annähern können, bevor eine Abstoßung durch Überlappung der Elektronenwolken auf Grund des Pauliprinzipis auftritt. Theoretische Arbeiten /44/, setzen als Näherung deshalb manchmal $V_\pi = 0$.

Dagegen wird für $M_L = 0$, zugehöriges Potential V_Σ ($\Lambda = 0$), die Abstoßung der Teilchen sehr stark sein und schon bei relativ großen Kernabständen erfolgen.

Wir haben also:

$$\begin{aligned} \langle L=1, M_L=0 | V | L=1, M_L=0 \rangle &= V_\Sigma \\ \langle L=1, M_L=\pm 1 | V | L=1, M_L=\pm 1 \rangle &= V_\pi \end{aligned} \quad (2.1)$$

Da ja V nicht auf den Spin wirkt, kann man von der Basis $|L, M_L\rangle_z$ zur Basis $|j, M\rangle_z$ einfach durch Clebsch - Gordon Kopplung übergehen:

$$|j, M\rangle = \sum_{M_L, M_S} \langle L, S, M_L, M_S | j, M \rangle |L, M_L\rangle |S, M_S\rangle \quad (2.2)$$

Die Matrixelement von V bezüglich der Basis $|j, M\rangle$ bekommt man dann aus:

$$\begin{aligned} \langle j', M' | V | j, M \rangle &= \sum_{M_L, M_S} \langle L, S, M_L', M_S' | j', M' \rangle \langle L, S, M_L, M_S | j, M \rangle \\ &\quad \cdot \langle L, M_L' | V | L, M_L \rangle \langle S, M_S' | S, M_S \rangle \end{aligned} \quad (2.3)$$

Daraus folgt: $M_S' = M_S$ und $M_L' = M_L$. Also auch $M' = M$

Somit bekommt (2.3) die vereinfachte Form:

$$\langle j' M' | V | j M \rangle = \sum_{M_L, M_S} \langle L S M_L M_S | j' M \rangle \langle L S M_L M_S | j M \rangle V_{M_L} \quad (2.4)$$

Die Matrixelemente von $W = A \cdot \vec{L} \cdot \vec{S}$ bezüglich der Basis $|j M\rangle$ bekommt man mit Hilfe der Relation:

$$\vec{L} \cdot \vec{S} |j M\rangle = \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2} |j M\rangle \quad (2.5)$$

und damit für $j = 1/2$:

$$\langle \frac{1}{2} M | W | \frac{1}{2} M \rangle = -A$$

und für $j = 3/2$:

$$\langle \frac{3}{2} M | W | \frac{3}{2} M \rangle = +\frac{A}{2} \quad (2.6)$$

Die Feinstrukturaufspaltung $\Delta \mathcal{E}$ ist demnach $\Delta \mathcal{E} = 3/2 A$.

Verschiebt man willkürlich den Energienullpunkt um $A = 2/3 \Delta \mathcal{E}$, so liefert W für den $^2P_{1/2}$ -Zustand keinen Beitrag, für den $^2P_{3/2}$ -Zustand den Beitrag $\Delta \mathcal{E}$.

Somit bekommt man aus (2.4) und (2.6) für die Matrix $\langle j' M' | V + W | j M \rangle$ die Form (zur Diagonalisierung bereits geeignet umgeordnet) (siehe auch /44/):

$$(V+W)_{j'M', jM} = \begin{array}{c|cc|cc|c} \begin{array}{c} |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \\ \bar{V} \\ -\frac{\sqrt{2}}{3} \Delta V \end{array} & \begin{array}{c} |\frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle \\ -\frac{\sqrt{2}}{3} \Delta V \end{array} & \begin{array}{c} |\frac{3}{2} \frac{3}{2}\rangle \\ 0 \end{array} & \begin{array}{c} |\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle \\ 0 \end{array} & \begin{array}{c} |\frac{3}{2} -\frac{1}{2}\rangle \\ 0 \end{array} & \begin{array}{c} |\frac{3}{2} -\frac{3}{2}\rangle \\ 0 \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} \bar{V} + \frac{\Delta V}{3} + \Delta \mathcal{E} \\ 0 \end{array} & \begin{array}{c} \bar{V} - \frac{\Delta V}{3} + \Delta \mathcal{E} \\ 0 \end{array} & \begin{array}{c} \bar{V} \\ -\frac{\sqrt{2}}{3} \Delta V \end{array} & \begin{array}{c} \bar{V} - \frac{\Delta V}{3} + \Delta \mathcal{E} \\ 0 \end{array} & \begin{array}{c} \bar{V} + \frac{\Delta V}{3} + \Delta \mathcal{E} \end{array} \end{array} \quad (2.7)$$

Dabei ist

$$\bar{V} = \frac{1}{3} V_{\Sigma} + \frac{2}{3} V_{\Pi}, \quad \Delta V = V_{\Sigma} - V_{\Pi}$$

Da diese Matrix nicht diagonal ist, sind die bezüglich der Kernverbindungsachse quantisierten Zustände $|j M\rangle$ nicht die gesuchten Eigenzustände des Systems. Diese bekommt man wie üblich durch Berechnen der Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrix.

$$\begin{vmatrix} \bar{V} - \lambda & -\frac{\sqrt{2}}{3} \Delta V \\ -\frac{\sqrt{2}}{3} \Delta V & \bar{V} + \frac{\Delta V}{3} + \Delta \epsilon - \lambda \end{vmatrix} = (\bar{V} - \lambda) \left(\bar{V} + \frac{\Delta V}{3} + \Delta \epsilon - \lambda \right) - \frac{2}{9} \Delta V^2 \stackrel{!}{=} 0 \quad (2.8)$$

Als Lösung erhält man die Energieniveaus des Quasimoleküls:

$$\lambda_1 =: V_1 = \bar{V} + \frac{1}{2} \cdot \left\{ \Delta \epsilon + \frac{\Delta V}{3} - \sqrt{\Delta V^2 + \frac{2}{3} \Delta \epsilon \Delta V + \Delta \epsilon^2} \right\}$$

$$\lambda_2 =: V_2 = \bar{V} + \frac{1}{2} \cdot \left\{ \Delta \epsilon + \frac{\Delta V}{3} + \sqrt{\Delta V^2 + \frac{2}{3} \Delta \epsilon \Delta V + \Delta \epsilon^2} \right\}$$

(2.9)

$$\lambda_3 =: V_3 = \bar{V} - \frac{\Delta V}{3} + \Delta \epsilon = V_{\pi} + \Delta \epsilon$$

Grenzverhalten für $\Delta V \gg \Delta \epsilon$, d.h. R klein:

$$V_1 \rightarrow \bar{V} + \frac{\Delta V}{6} - \frac{\Delta V}{2} = V_{\pi}$$

deshalb heißt der zugehörige Zustand $|\pi \pm \frac{1}{2}\rangle$

$$V_2 \rightarrow \bar{V} + \frac{\Delta V}{6} + \frac{\Delta V}{2} = V_{\Sigma}$$

deshalb heißt der zugehörige Zustand $|\Sigma \pm \frac{1}{2}\rangle$

$$V_3 \rightarrow V_{\pi}$$

deshalb heißt der zugehörige Zustand $|\pi \pm \frac{3}{2}\rangle$

In /44,45/ sind dazu die Eigenvektoren angegeben, nämlich:

$$V_1: |\pi \pm \frac{1}{2}\rangle = \cos \chi |\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle \pm \sin \chi |\frac{3}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle \xrightarrow[R \rightarrow \infty]{\Delta V \ll \Delta \epsilon} |\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle$$

$$V_2: |\pi \pm \frac{1}{2}\rangle = -\sin \chi |\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle \pm \cos \chi |\frac{3}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle \xrightarrow[R \rightarrow \infty]{\Delta V \ll \Delta \epsilon} |\frac{3}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle$$

$$V_3: |\pi \pm \frac{3}{2}\rangle = |\frac{3}{2} \pm \frac{3}{2}\rangle \quad (2.10)$$

$$\text{Mit } \tan 2\chi = \frac{2\sqrt{2}}{3} \cdot \frac{\Delta V}{\Delta \epsilon + \Delta V/3} \longrightarrow 0 \text{ für } \Delta V \ll \Delta \epsilon$$

Daraus sieht man also: Das atomare P - Dublett geht bei Annäherung eines Edelgasatoms in drei molekulare Zustände über, die man im Grenzfall kleiner Kernabstände, also starker molekularer Kopplung mit $\pi_{\frac{1}{2}}$, $\pi_{\frac{3}{2}}$ und $\Sigma_{\frac{1}{2}}$ Zuständen identifizieren kann. Wegen der starken Austauschwechselwirkung liegt der $\Sigma_{1/2}$ - Zustand ($\Lambda = 0$) höher als der $\pi_{1/2}$ - Zustand ($\Lambda = 1$) (siehe auch Abb.4) und korrespondiert deshalb, wie auch der Grenzübergang $R \rightarrow \infty$ zeigt, mit dem atomaren $^2P_{3/2}$ - Zustand $m_j = \pm 1/2$, während der $\pi_{1/2}$ - Zustand in den atomaren $^2P_{1/2}$ - Zustand $m_j = \pm 1/2$ übergeht. Der Zustand $\pi_{3/2}$, der - wie man aus der Energiematrix erkennt - mit den beiden anderen nicht wechselwirkt, liegt zwischen beiden und gehört zum atomaren $^2P_{3/2}$ $m_j = \pm 3/2$ Zustand. Damit sind die in Abb.2 schematisch gezeigten Potentialkurven erklärt.

Die Form der Kurven V_1 , V_2 , V_3 ergibt sich natürlich aus der Annahme, die man für V_{Σ} und V_{π} macht. Suzor /44/ benutzt für Rb - He z.B. die Näherung $V_{\pi} = 0$ und für V_{Σ} ein reines Austauschpotential ($\propto R^{2.558} e^{-0.877 \cdot R}$). Darauf wird im Kapitel III 1.2.2.1 noch genauer eingegangen.

Eine andere Näherung, die sich auf Berechnungen von Smirnov (Ref. in /36/) stützt und einen anziehenden Van der Waals Term und einen abstoßenden Wechselwirkungsterm sowohl für V_{Σ} als auch für V_{π} enthält (wobei in /36/

*) Hunds Fall a: $\Delta V \gg \Delta \epsilon \gg \hbar \dot{\phi}$ ($\dot{\phi}$ = Winkelgeschwindigkeit der Kernverbindungsachse). Kopplung von L und S an die Achse. Zum Gebrauch der verschiedenen Hundschen Kopplungsfälle für die Beschreibung der Stoßübergänge siehe z.B. /46/. Eingeführt wurde die Beschreibung von Stoßübergängen durch verschiedene Hundsche Kopplungsfälle zuerst von Nikitin /47/.

allerdings zur Berechnung von ΔV der Austauschterm von V_{π} weggelassen wurde und nur der Van der Waals Term benutzt wurde.), liefert recht gute Ergebnisse für $\sigma_{1/2}^{(1)}$.

Neben diesen analytischen Formen für V_{Σ} und V_{π} gibt es noch numerisch berechnete Daten für V_1, V_2, V_3 , z.B. von Kielkopf /48/ und die sehr häufig benutzten Daten von Baylis /49/ (benutzt elektrostatische Wechselwirkung, d.h. R^{-6} Van der Waals Teil und Pseudowechselwirkung auf Grund des Pauliprinzip) und seit kürzerer Zeit die Potentiale von Pascale und Vandeplanque /50/ (gleiche Wechselwirkung wie in /49/, aber Benutzung einer vollständigeren Basis).

2.2 Prinzip der Depolarisation, Einhaltepunktmodell

Elbel /11/ hat ein sehr einfaches und anschauliches Stoßmodell, das Einhaltepunktmodell eingeführt. Für Natrium findet man eine genaue Beschreibung in /6/. Obwohl das Einhaltepunktmodell für Rubidium keine guten Ergebnisse liefert, wie in /7/ gezeigt wurde, und vor allem die Depolarisation des $^2P_{1/2}$ - Zustands nicht erklären kann ($m_j \rightarrow -m_j$ Auswahlregel), zeigt es jedoch deutlicher als aufwendigere Rechnungen, wie man sich die Stoßwirkung vorzustellen hat. Deshalb soll es hier noch einmal kurz beschrieben werden.

Wie man in Abb.5 erkennt,denkt man sich den Stoß in drei Phasen aufgeteilt.

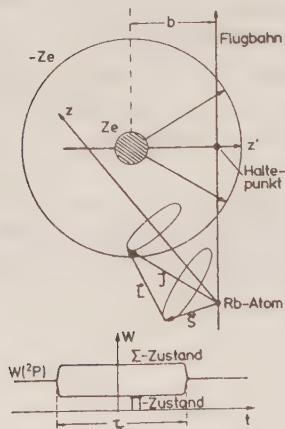


Abb.5: Schematische Darstellung zum Einhaltepunktmodell.

1. Das Rubidiumatom wird nichtadiabatisch schnell an den Haltepunkt gebracht (Ort kleinsten Abstandes zwischen den Stoßpartnern; $R_0 = b$ bei geradliniiger Trajektorie).
2. Das Rubidiumatom verbleibt während der gesamten Stoßdauer τ_c in diesem Punkt. Die ganze Stoßwirkung spielt sich dort ab. Die Zustände des Atoms sind während dieser Zeit der (konstanten) molekularen Wechselwirkung $V(b)$ unterworfen.
3. Das Rubidiumatom wird nichtadiabatisch schnell vom Haltepunkt weg aus dem Wechselwirkungsbereich gebracht.

Wenn nun die Alkaliatome bezüglich einer raumfesten Achse z in einem reinen Zustand $|j m_j\rangle$ sind, so sind sie dies nicht bezüglich der Kernverbindungsachse z' . Vielmehr ist $|j m_j\rangle$ darzustellen als Überlagerung von Zuständen $|j m_j'\rangle$, quantisiert entlang z' . Mathematisch hat man dies zu beschreiben durch eine Drehung des ungestrichenen in das gestrichene Koordinatensystem um die Eulerschen Winkel γ, β, α :

$$|j m_j\rangle = \sum_{m_j'} D_{m_j', m_j}^j(-\gamma - \beta - \alpha) |j m_j'\rangle \quad \text{vor dem Stoß} \quad (2.11)$$

Würden nun die Zustände $|j m_j'\rangle$ während des Stoßes derselben Wechselwirkungsenergie unterliegen, so würde der Stoß lediglich zu einer Dephasierung des einlaufenden Zustands führen, da in (2.11) dann einfach die Phase $\exp(i\varphi)$, $\varphi = \tau_c V/\hbar$, vor die Summe zu ziehen ist.

Nun haben wir aber in Abschnitt 2.1 gezeigt, daß im $^2P_{3/2}$ -Zustand die Zustände mit verschiedenen $|m_j|$ in verschiedene nicht entartete Molekülzustände ($\Sigma_{1/2}$ und $\Pi_{3/2}$) aufspalten. Das führt dazu, daß die Zustände $|j m_j'\rangle$ mit verschiedenen $|m_j'|$ jetzt verschiedenes Zeitverhalten während des Stoßes haben und somit im auslaufenden Zustandsgemisch $|4\rangle$ gegeneinander dephasiert sind.

$$|4\rangle = \sum_{m_j'} D_{m_j', m_j}^j(-\gamma - \beta - \alpha) e^{i \cdot \varphi_{|m_j'|}} |j m_j'\rangle \quad \text{nach dem Stoß} \quad (2.12)$$

mit

$$\varphi_{|m_j'|} = \frac{\tau_c}{\hbar} V_{|m_j'|}$$

Offenbar ist $|\Psi\rangle$ kein reiner Zustand $|j m_j\rangle$ bezüglich der raumfesten Achse z mehr, da man die Phasenfaktoren nun nicht mehr vor die Summe ziehen kann. In $|\Psi\rangle$ sind auch Anteile von Zuständen mit anderen $|m_j|$ enthalten. Auftreten anderer m_j - Zustände bedeutet aber gerade Depolarisation. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude mit der ein Zustand $|j n_j\rangle$ in $|\Psi\rangle$ enthalten ist, ist die Projektion $\langle j n_j | \Psi \rangle$. Die $\langle j n_j | \Psi \rangle$ sind in /7/ für Rubidium berechnet worden.

Daraus erkennt man also: Zur Umbesetzung der Zeemanterme eines j -Zustands ist es notwendig, daß der atomare j - Zustand durch die Wechselwirkung mit dem Stoßpartner in zwei oder mehr molekulare Zustände aufspaltet. In unserem einfachen Modell führt dies zu einer Dephasierung der Zustände mit verschiedenen $|m_j|$ gegeneinander.

2.3 Depolarisation des $^2P_{1/2}$ - Zustands, halbklassische Theorie nach /36/, /44/

In 2.2 hatten wir ja gezeigt, daß eine Aufspaltung des atomaren Niveaus während des Stoßes notwendige Voraussetzung für die Umbesetzung des Niveaus ist. Danach dürfte - im Widerspruch zu experimentellen Befunden - der für schwere Alkali isolierte $^2P_{1/2}$ - Zustand überhaupt nicht depolarisiert werden, da dieser, wie in 2.1 gezeigt, adiabatisch in den molekularen $^2\Pi_{1/2}$ - Zustand übergeht. In der Tat ist die Vorstellung, daß eine adiabatische Aufspaltung nötig ist, längst überholt und findet sich nur in etwa zehn Jahre zurückliegenden Veröffentlichungen, wie z.B. /14, 38, 51, 30/. Gordeyev et.al. /36/ zeigten, daß im $^2P_{1/2}$ - Zustand ein grundlegend anderer Depolarisationsmechanismus wirksam ist. Zwar muß weiterhin der Zustand aufspalten, doch braucht diese Aufspaltung keine adiabatische zu sein, sondern wird verursacht durch die Drehung der internuklearen Achse während des Stoßes (Corioliswechselwirkung). Wenn der $^2P_{1/2}$ - Zustand in den molekularen $^2\Pi_{1/2}$ - Zustand übergeht, ist im Grenzfall starker Kopplung (Hunds Fall a. Kleine Abstände) der Elektronendrehimpuls fest an die interatomare Achse gekoppelt. Das heißt, er dreht mit, wenn die Achse sich während des Stoßes dreht. Schon daraus erkennt man, daß der Drehimpuls nach dem Stoß umorientiert sein muß. Daß diese Drehung zu einer Energieaufspaltung der Zustände mit $m_j = +1/2$ und $m_j = -1/2$ führen muß, erkennt man folgendermaßen: Wählt man willkürlich die einzige während des Stoßes feste Achse, nämlich die

senkrecht auf der Stoßebene stehende, als Quantisierungsachse, so repräsentiert eine Überlagerung der bezüglich dieser Achse quantisierten Zustände $m_j = +1/2$ und $m_j = -1/2$ ($|1/2\rangle_{z_L}$ und $|-1/2\rangle_{z_L}$) den ${}^2\Pi_{1/2}$ -Zustand. Wenn sich der an die Achse gekoppelte Drehimpuls dieses Zustands nun mit der Winkelgeschwindigkeit $\dot{\phi}$ in der Stoßebene dreht, so können die Zustände $|1/2\rangle_{z_L}$ und $|-1/2\rangle_{z_L}$ unmöglich gleiches Zeitverhalten haben, sondern müssen eine Phasenverschiebung gegeneinander haben, die nur durch eine Energieaufspaltung der Zustände um $\hbar\dot{\phi}$ möglich wird. Diese (von Elbel vorgeschlagene) anschauliche Deutung der nichtadiabatischen Aufspaltung entspricht ganz der Theorie beim Zeeman-effekt, wo die Zeemanaufspaltung zu einer Rotation des gegen die Achse geneigten Drehimpulses mit der Larmorfrequenz führt. Die Aufspaltung ist im Grenzfall starker Wechselwirkung $\hbar\dot{\phi}$ und muß gegen Null gehen, wenn der Abstand der Stoßpartner so groß wird, daß keine molekulare Kopplung mehr vorhanden ist.

Man könnte also in einem einfachen Modell sagen, daß unterhalb eines kritischen Kernabstandes R_1 totale Kopplung, Übergangswahrscheinlichkeit $m_j = +1/2$ nach $m_j = -1/2$ gleich 1, und oberhalb von R_1 keine Kopplung, Übergangswahrscheinlichkeit gleich Null, herrscht.

Wesentlich besser ist es natürlich, die nichtadiabatische Aufspaltung in Abhängigkeit vom Kernabstand zu berechnen und daraus die Übergangswahrscheinlichkeiten zu entnehmen. Dies ist in /36/ und /44,45/ geschehen. Die wichtigsten Schritte dieser Rechnung werden im folgenden wiedergegeben:

Wie wir in 2.1 gesehen haben, ist die Energiematrix $\langle V+W \rangle$ geschrieben in der Basis der mit dem ${}^2\Pi_{1/2}$ -Zustand korrespondierenden Zustände $\Pi_{\pm 1/2}$ zu schreiben als:

$$\begin{array}{|c|c|}
 \hline
 | \Pi_{+1/2} \rangle & | \Pi_{-1/2} \rangle \\
 \hline
 V_1 & 0 \\
 0 & V_1 \\
 \hline
 \end{array} \quad (2.13)$$

Dies, wie in 2.2 festgestellt, führt zu einer einfachen Dephasierung durch den Stoß. Um die Drehung der molekularen Achse berücksichtigen zu können, müssen wir nun eine zeitabhängige Basis $|e_j\rangle$ wählen. Ein Zustand $|4\rangle$ wird dann dargestellt durch

$$|\psi\rangle = \sum_j a_j(t) |e_j(t)\rangle \quad (2.14)$$

Anwendung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$\hbar i \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle \quad (2.15)$$

ergibt:

$$\hbar i \sum_j \dot{a}_j(t) |e_j(t)\rangle + \hbar i \sum_j a_j(t) \frac{d}{dt} |e_j(t)\rangle = \sum_j a_j(t) H |e_j(t)\rangle \quad (2.16)$$

und damit durch Multiplikation mit $\langle e_m|$:

$$\hbar i \dot{a}_m(t) = \sum_j a_j(t) \langle e_m(t) | H - \hbar i \frac{d}{dt} | e_j(t) \rangle \quad (2.17)$$

D.h. bei Benutzung einer zeitabhängigen Basis kommt ein nichtadiabatischer Hamiltonoperator hinzu:

$$H_R = -\hbar i \frac{d}{dt} \quad (2.18)$$

In dem in Abb.3 skizzierten Koordinatensystem bei Wahl der Basis $|j M\rangle$ kann die Zeitabhängigkeit geschrieben werden als:

$$|j M\rangle_t = e^{-i\phi(t)\mathcal{J}_y} |j M\rangle_{-\infty} \quad (2.19)$$

(Drehung um den Winkel ϕ um die y - Achse)

Also

$$\begin{aligned} -\hbar i \frac{d}{dt} |j M\rangle_t &= -\hbar i \frac{d\phi}{dt} \frac{d}{d\phi} |j M\rangle_t \\ &= -\hbar \dot{\phi} \mathcal{J}_y |j M\rangle_t \end{aligned} \quad (2.20)$$

In diesem Fall ist demnach H_R zu schreiben als

$$H_R = -\hbar \dot{\phi} \mathcal{J}_y \quad (2.21)$$

Mit $\mathcal{J}_y = -\frac{i}{2} (\mathcal{J}^+ - \mathcal{J}^-)$

erhält man die - ausnahmslos nichtdiagonalen - Matricelemente von H_R in der Basis $|j M\rangle$

$$\begin{aligned} \langle \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} | H_R | \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \rangle &= \mp i\hbar \frac{\dot{\phi}}{2} \\ \langle \frac{3}{2} \pm \frac{3}{2} | H_R | \frac{3}{2} \pm \frac{1}{2} \rangle &= \mp i\hbar \frac{\sqrt{3}}{2} \dot{\phi} \\ \langle \frac{3}{2} \pm \frac{1}{2} | H_R | \frac{3}{2} \pm \frac{1}{2} \rangle &= \mp i\hbar \dot{\phi} \end{aligned} \quad (2.22)$$

In der Basis $|\pi \pm \frac{1}{2}\rangle = \cos \chi |\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle \pm \sin \chi |\frac{3}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle$ ergibt sich daraus

$$\langle \pi + \frac{1}{2} | H_R | \pi - \frac{1}{2} \rangle = i \hbar \dot{\phi} \cdot \frac{3}{4} \left(\frac{1}{3} - \cos 2\chi \right) =: i V_R' \quad (2.23)$$

und $\langle \pi - \frac{1}{2} | H_R | \pi + \frac{1}{2} \rangle = -i V_R'$

so daß die vollständige Matrix (statt (2.13)) nun heißt:

$ \pi + \frac{1}{2}\rangle$	$ \pi - \frac{1}{2}\rangle$
V_1	$i V_R'$
$-i V_R'$	V_1

(2.24)

Die Zustände $^2\Pi_{\pm 1/2}$ sind also bei Berücksichtigung der nichtadiabatischen Wechselwirkung H_R nicht die Eigenzustände des Systems und können es auch gar nicht sein, da sie bezüglich der rotierenden Kernverbindungsachse quantisiert sind. Wir werden also als Basis Zustände suchen, die bezüglich der senkrecht auf der Stoßebene stehenden Achse quantisiert sind. Vom alten Koordinatensystem zum neuen kommt man durch die Drehung um $(\phi, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$

$$|\gamma \pm \frac{1}{2}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} e^{\pm i \frac{\phi}{2}} \cdot (|\pi + \frac{1}{2}\rangle \pm i |\pi - \frac{1}{2}\rangle) \quad (2.25)$$

Mit dieser Basis erhält die Matrix $\langle \gamma \pm \frac{1}{2} | V+W+H_R | \gamma \pm \frac{1}{2} \rangle$ die Form

$ \gamma + \frac{1}{2}\rangle$	$ \gamma - \frac{1}{2}\rangle$
$V_1 + V_R$	0
0	$V_1 - V_R$

(2.26)

mit

$$V_R = V_R' + \hbar \dot{\phi} / 2 = \frac{3}{4} \hbar \dot{\phi} (1 - \cos 2\chi)$$

Die Zustände mit $m_j = +1/2$ und $m_j = -1/2$ spalten also in einer nichtadiabatischen Theorie auf. Die Aufspaltung ist gerade $2 \cdot V_R$. Also haben wir diese Aufspaltung und damit den "Kopplungsgrad" des Drehimpulses an die Achse für alle Kernabstände R berechnet.

$$2 \cdot V_R = \frac{3}{2} \hbar \dot{\phi} \left(1 - \frac{\Delta \epsilon + \frac{1}{3} \Delta V}{\sqrt{\Delta \epsilon^2 + \frac{2}{3} \Delta \epsilon \Delta V + \Delta V^2}} \right) \quad (2.27)$$

entnommen aus /36/

In /36/ und /44/ ist mit Hilfe des S - Matrix - Formalismus gezeigt, daß gilt

$$\sigma(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2} - \frac{1}{2}) = 2\pi \int_0^{\frac{2}{3}} \sin^2 \left[\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} V_R(R) dt \right] b db \quad (2.28)$$

Unter der Annahme einer klassischen Bahn (halbklassische Theorie), die bestimmt wird vom adiabatischen Potential V_1 (siehe Abschn. 2.1) läßt sich die Integration über t in eine über R umschreiben:

$$\frac{dR}{dt} = v_r \cdot \sqrt{1 - \frac{b^2}{R^2} - V_1(R)/W} \quad (2.29)$$

W = kinetische Relativenergie

v_r = Relativgeschwindigkeit = $\dot{\phi} R^2/b$

also folgt

$$\sigma(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2} - \frac{1}{2}) = 2\pi \int_0^{\frac{2}{3}} \sin^2 \left[\frac{2}{v_r \cdot \hbar} \int_{R_0}^{\infty} V_R(R) \frac{dR}{\sqrt{1 - \frac{b^2}{R^2} - \frac{V_1}{W}}} \right] b db \quad (2.30)$$

V_R eingesetzt ergibt

$$\sigma_{1/2}^{(A)} = 2 \cdot \sigma(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2} - \frac{1}{2}) = 4\pi \cdot \frac{2}{3} \int_0^{\frac{2}{3}} \sin^2 [\alpha(b)] b db \quad (2.31)$$

$$\alpha(b) = \int_{R_0}^{\infty} \underbrace{\left[1 - \frac{\Delta \mathcal{E} + \frac{1}{3} \Delta V}{\sqrt{\Delta \mathcal{E}^2 + \frac{2}{3} \Delta \mathcal{E} \Delta V + \Delta V^2}} \right]}_F \frac{b dR}{R^2 \cdot \sqrt{1 - \frac{b^2}{R^2} - V_1(R)/W}} \quad (2.32)$$

Gleichung (2.32) kann leicht interpretiert werden. Der zweite Teil ist grade der Winkel, der von der Kernverbindungsachse während des Stoßes überstrichen wird. Der erste Teil, der im folgenden "F" genannt werden soll, beschreibt die molekulare Wechselwirkung. Er geht gegen Eins für $\Delta V \gg \Delta \mathcal{E}$ und rasch gegen Null für $\Delta V \rightarrow 0$. Es ist also wichtig, daß die Atome so nah zusammenkommen, daß die molekulare Wechselwirkung dominiert. Sind dann noch die Streuwinkel hinreichend groß, wird eine sehr starke Depolarisation des $^2P_{1/2}$ - Zustands zu erwarten sein.

ΔV berechnet man aus den beiden Gleichungen für V_1 und V_2 (2.9) und erhält

$$\Delta V = -\frac{\Delta \epsilon}{3} + \sqrt{(V_2 - V_1)^2 - \frac{8}{9} \Delta \epsilon^2} \quad (2.33)$$

Wir haben $\sigma_{1/2}^{(1)}$ mit den Gleichungen (2.31 - 2.33) für verschiedene Temperaturen mit einem Fortranprogramm berechnet. Für V_1 und ΔV wurden dabei die Pascale Vandeplanque Potentiale benutzt. Die Ergebnisse für $T=325$ K finden sich in der Tabelle 1 in Kapitel II 3. Eine ausführliche Diskussion der Rechnungen sowie die graphische Darstellung von $F(R)$ findet sich in Lauf der Arbeit im III. Teil.

3. Das Meßverfahren

3.1 Zusammenhang zwischen Tensorpolarisationen und den verschiedenen Fluoreszenzlichtkomponenten

Zur Beschreibung von Relaxationsphänomenen kann man die Zustände als Basis wählen und den Dichteoperator mit Hilfe der Operatoren $|j m_j\rangle\langle j m_j|$ schreiben als Entwicklung

$$\bar{\rho} = \sum_{m_j, m_j'} \rho_{m_j, m_j'} |j m_j\rangle\langle j m_j'| \quad (3.1)$$

wobei natürlich gelten muß

$$\langle j m_j | \bar{\rho} | j m_j' \rangle = \rho_{m_j, m_j'} \quad (3.2)$$

$\rho_{m_j, m_j'}$ ist also die Besetzungszahl des Zustandes $|j m_j\rangle$. In diesem Fall stellt man Bilanzgleichungen für die $\rho_{m_j, m_j'}$ auf, um die Relaxation einer Observablen zu beschreiben. Man erhält so einen Satz gekoppelter Differentialgleichungen, deren Lösung eine relativ komplizierte Zeitabhängigkeit hat der Form

$$\rho_{m_j, m_j'} = \sum_i A_i e^{-\gamma_i t} \quad (3.3)$$

Einfacher ist es, irreduzible Tensoren T_q^k (Fano /25/, Omont /26/, Dyakonov u. Perel /27/) als Basis zu wählen. In /26/ und /27/ wird gezeigt, wie diese Darstellung genutzt werden kann, um eine einfache Beschreibung der Stoßrelaxation zu bekommen. In diesem Formalismus tritt an Stelle von Gl. (3.1) die Entwicklung

$$\bar{\rho} = \sum_{q, k} \rho_q^k T_q^{k*} \quad (3.4)$$

Dabei muß gelten, daß die Entwicklungskoeffizienten ρ_q^k die Erwartungswerte der T_q^k sind.

$$\rho_q^k = \text{Spur} (\bar{\rho} \cdot T_q^k) = \langle T_q^k \rangle \quad (3.5)$$

Damit erhält man für die ρ_q^k eine sehr einfache Zeitabhängigkeit

$$\rho_q^k = A_q^k e^{-\gamma_k \cdot t} \quad (3.6)$$

Die Tensorpolarisationen relaxieren also mit nur einer Zeitkonstante im Gegensatz zu den $\rho_{m_j, m_j'}$. (Die allgemeine Umrechnung der $\rho_{m_j, m_j'}$ - Darstellung in die mit irreduziblen Tensoren ist z.B. in /44,31/ angegeben).

Werden keine Kohärenzen zwischen den Zeemantermen $|j, m_j\rangle$ und $|j, m_j'\rangle$ ($m_j \neq m_j'$) angeregt, so sind im erstgenannten Formalismus die Nichtdiagonalelemente der Dichtematrix $\rho_{m_j, m_j'} = 0$ und im zweiten Formalismus genügt es, sich auf die Operatoren T_0^k der Ordnung Null zu beschränken.

Wählt man als T_0^k die Operatoren des Drehimpulses J_x, J_y, J_z so erhält man (Omont /26/, Brink a. Satchler /52/) :

$$\begin{aligned} \rho_0^0 &\propto \text{Spur}(\rho) && \text{Monopol} \\ \rho_0^1 &\propto \langle J_z \rangle = \sum_{m_j} \rho_{m_j, m_j} \cdot m_j && \text{Dipolpolarisation} \\ \rho_0^2 &\propto \langle J_z^2 - \frac{1}{3} J^2 \rangle = \sum_{m_j} \rho_{m_j, m_j} \cdot (m_j^2 - \frac{1}{3} j(j+1)) && \text{Quadrupolpolarisation} \\ &&& \text{("alignment")} \\ \rho_0^3 &\propto \langle 5 J_z^3 + J_z - 3 J^2 \cdot J_z \rangle && \text{Oktupolpolarisation} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Da wir keine Nichtdiagonalelemente zu berücksichtigen haben, sei im folgenden die Besetzungszahl ρ_{m_j, m_j} des Zustandes $|j, m_j\rangle$ mit ρ_{m_j} abgekürzt

D₁ - Linie

Aus den relativen Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den Zeemantermen des Grund - und angeregten Zustands (Abb.1) erkennt man, daß im Fall $j = 1/2$ für die Intensität des rechts - und linkszirkularen D₁ - Fluoreszenzlichtes gilt:

$$\begin{aligned} I_{0+}^0 &\propto 2 \rho_{1/2} \\ I_{0-}^0 &\propto 2 \rho_{-1/2} \end{aligned} \quad \begin{array}{l} \text{Der Index } 0 \text{ bedeutet: Intensitäten sind} \\ \text{über den gesamten Raumwinkel } 4\pi \text{ integriert} \end{array}$$

Also:

$$I_{0+}^0 - I_{0-}^0 \propto 2(\rho_{1/2} - \rho_{-1/2}) \propto \frac{1}{2}(\rho_{1/2} - \rho_{-1/2}) = \langle J_z \rangle$$

$$\text{und} \quad I_{0+}^0 + I_{0-}^0 \propto 2(\rho_{1/2} + \rho_{-1/2}) \propto \rho_{1/2} + \rho_{-1/2} = \text{Spur}(\rho)_{j=1/2} \quad (3.8)$$

Strahlt man also z.B. nur rechtszirkulares Licht ein, so wird $S_{1/2} \neq S_{-1/2}$ sein. Die daraus resultierende Dipolpolarisation des $^2P_{1/2}$ - Zustands kann man messen, indem man die Differenz des rechts - und linkszirkularen Fluoreszenzlichtes mißt. Da die Summe von recht - und linkszirkularem Licht proportional zur Spur(S) ist, also angibt, 'wieviel Atome überhaupt in den $^2P_{1/2}$ - Zustand angeregt sind, kann dieses Signal gut zur Normierung des Differenzsignals benutzt werden. $\frac{I_{\sigma+}^{\circ} - I_{\sigma-}^{\circ}}{I_{\sigma+}^{\circ} + I_{\sigma-}^{\circ}}$ ist der Polarisationsgrad.

D₂ - Linie

Die relativen Übergangswahrscheinlichkeiten zeigen, daß folgende Relationen für den Übergang $^2P_{3/2} \longrightarrow ^2S_{1/2}$ gelten:

$$I_{\sigma+}^{\circ} \propto 3S_{3/2} + S_{1/2}$$

$$I_{\sigma-}^{\circ} \propto 3S_{-3/2} + S_{-1/2}$$

Also:
$$I_{\sigma+}^{\circ} - I_{\sigma-}^{\circ} \propto \frac{3}{2}S_{3/2} + \frac{1}{2}S_{1/2} - \frac{3}{2}S_{-3/2} - \frac{1}{2}S_{-1/2} \propto \langle J_z \rangle$$

und
$$I_{\sigma+}^{\circ} + I_{\sigma-}^{\circ} \propto \text{Spur}(S) \quad (3.9)$$

D.h. auch für die D₂ - Linie ist $I_{\sigma+}^{\circ} - I_{\sigma-}^{\circ}$ proportional zur Dipolpolarisation. Sie kann also auf die gleiche Art gemessen werden wie bei der D₁ - Linie. Eine Normierung auf das Summensignal kann hier allerdings nicht vorgenommen werden.

Weiter gilt für die D₂ - Linie:

$$I_{\sigma}^{\circ} \propto 3S_{3/2} + 3S_{-3/2} + S_{1/2} + S_{-1/2}$$

$$I_{\pi}^{\circ} \propto 2S_{1/2} + 2S_{-1/2}$$

So daß folgt:

$$\frac{1}{2}I_{\sigma}^{\circ} - I_{\pi}^{\circ} \propto \frac{3}{2}(S_{3/2} + S_{-3/2} - S_{1/2} - S_{-1/2}) \propto \langle J_z^2 - \frac{1}{2}J^2 \rangle$$

und
$$\frac{1}{2}I_{\sigma}^{\circ} + \frac{1}{2}I_{\pi}^{\circ} \propto \frac{3}{2}(S_{3/2} + S_{-3/2} + S_{1/2} + S_{-1/2}) \propto \text{Spur}(S) = 3/2 \quad (3.10)$$

Ein alignment im $^2P_{3/2}$ - Zustand kann also durch Messung von I_{σ} und I_{π} (und Bilden von $1/2 I_{\sigma} - I_{\pi}$) bestimmt werden. Das Signal $1/2 I_{\sigma} + 1/2 I_{\pi}$ kann zur Normierung benutzt werden.

3.2 Prinzip des Versuchsaufbaus

Für die Messungen der Dipolpolarisation sind nach 3.1 zunächst zwei Forderungen an das Experiment zu stellen:

1. Erzeugung einer Polarisation durch Einstrahlen von zirkular polarisiertem Rubidium D_1 - oder D_2 - Fluoreszenzlicht.
2. Beobachtung einer zu $I_{\sigma^+}^0$ und $I_{\sigma^-}^0$ -proportionalen Fluoreszenzlichtintensität.

In /6/ ist gezeigt, daß bei Beobachtung der Fluoreszenz unter einem Winkel α gegen die Einstrahlungsrichtung für die rechts - und linkszirkularen Komponenten gilt:

$$I_r(\alpha) = \frac{1}{4} I_{\sigma^+}^0 (1 + \cos \alpha)^2 + \frac{1}{2} I_{\pi}^0 (\sin \alpha)^2 + \frac{1}{4} I_{\sigma^-}^0 (1 - \cos \alpha)^2 \quad (3.11)$$

$$I_l(\alpha) = \frac{1}{4} I_{\sigma^-}^0 (1 + \cos \alpha)^2 + \frac{1}{2} I_{\pi}^0 (\sin \alpha)^2 + \frac{1}{4} I_{\sigma^+}^0 (1 - \cos \alpha)^2$$

Beobachtet man also I_r und I_l unter einem möglichst kleinen Winkel α gegen die Rückwärtsrichtung mit Hilfe eines Zirkularanalysators ($\lambda/4$ - Plättchen und Linearpolarisator), so beobachtet man außer der gewünschten Komponente auch π - Licht und Anteile der anderen Komponente. Da diese aber in beiden Komponenten im gleichen Maße vorhanden sind, treten sie bei der Differenzbildung nicht in Erscheinung, und es gilt (für D_1 und D_2):

$$I_r(\alpha) - I_l(\alpha) = (I_{\sigma^+}^0 - I_{\sigma^-}^0) \cdot (\cos \alpha) \propto \langle J_z \rangle \quad (3.12)$$

Für das Summensignal erhält man:

$$I_r(\alpha) + I_l(\alpha) = \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \alpha) (I_{\sigma^+}^0 + I_{\sigma^-}^0) + \sin^2 \alpha \cdot I_{\pi}^0 \quad (3.13)$$

Für die D_1 - Linie ergibt sich daraus:

$$I_r(\alpha) + I_l(\alpha) \propto 2 \cdot (p_{1/2} + p_{-1/2}) \quad (3.14)$$

Das Summensignal ist hier also winkelunabhängig und proportional zur Besetzungszahl des $^2P_{1/2}$ - Zustands.

Für die D_2 - Linie gilt:

$$I_r(\alpha) + I_e(\alpha) \propto \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \alpha) \cdot (3g_{3/2} + 3g_{-3/2} + g_{1/2} + g_{-1/2}) + \sin^2 \alpha (2g_{1/2} + 2g_{-1/2}). \quad (3.15)$$

Nur falls im ${}^2P_{3/2}$ - Zustand kein alignment aufgebaut ist, gilt:

$$g_{3/2} + g_{-3/2} = g_{1/2} + g_{-1/2}$$

Dann kann Gl. (3.15) zusammengefaßt werden zu:

$$I_r(\alpha) + I_e(\alpha) \propto g_{1/2} + g_{-1/2} \quad (3.16)$$

D.h. wenn im ${}^2P_{3/2}$ - Zustand kein alignment besteht, ist die Gesamtintensität winkelunabhängig und proportional zur Besetzung des Zustandes. Nur dann kann sie zur Normierung herangezogen werden. Ist aber, wie in den meisten Fällen, ein alignment vorhanden, so ist $I_r + I_l$ winkelabhängig. Das bedeutet für die Beobachtung unter einem festen Winkel α aber, daß sich $I_r + I_l$ verändert, wenn die Größe des alignment z.B. durch Stöße verändert wird.

Auf Grund der vorangegangenen Überlegungen empfiehlt sich folgende Beobachtungsart: Messung von I_r und I_l der D_1 und D_2 Linie getrennt und abwechselnd mit einem Zirkularanalysator unter einem möglichst kleinen Winkel α (wegen Gl.(3.12)) zur Einstrahlungsrichtung. Es wurde $\alpha \approx 30^\circ$ gewählt. Zur Normierung kann das D_1 - Summensignal benutzt werden.

Ein alignment im ${}^2P_{3/2}$ - Zustand - dieses wurde im III. Teil der Arbeit auch gemessen - kann am einfachsten durch Einstrahlen von linear polarisiertem Licht (siehe /7/) erzeugt werden. Aber auch bei Einstrahlen von zirkularem Licht entsteht ein alignment. Damit kann gleichzeitig mit $\sigma_{3/2}^{(1)}$ auch $\sigma_{3/2}^{(2)}$ gemessen werden. In /7/ und /18/ wurde gezeigt, daß bei Beobachtung unter $\alpha = 90^\circ$ und Trennung der σ - und π - Lichtkomponenten mit einem Linearpolarisator gilt:

$$I_\pi(90^\circ) \propto I_\pi^0 \quad \text{und} \quad I_\sigma(90^\circ) \propto 1/2 I_\sigma^0. \quad \text{Nach Gl. (3.10) gilt dann} \\ I_\sigma^2 \propto I_\sigma - I_\pi. \quad \text{Normiert werden kann auf die Größe } I_\sigma + 1/2 I_\pi.$$

3.3 Bilanzgleichungen, Auswertungsverfahren

Will man den Einfluß von Stößen auf die Größen ρ_0^1 und ρ_0^2 beobachten, so mißt man die Polarisation wie in 3.2 beschrieben und gibt zu dem Alkalidampf dann Edelgas hinzu. Dabei werden die Polarisationsgrade kleiner werden. Im Folgenden soll gezeigt werden, wie aus der Änderung der Polarisationsgrade mit dem Edelgasdruck p die Relaxationskonstanten γ^k oder die Wirkungsquerschnitte $\sigma^{(k)}$ gewonnen werden können.

Dazu muß natürlich zunächst der Zusammenhang zwischen ρ_0^k und p berechnet werden. Man geht von den Bilanzgleichungen für die Besetzungszahlen ρ_{mj} der Zeemanniveaus aus.

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{mj}}{dt} = & -\frac{\rho_{mj}}{\tau} - N v_r \rho_{mj} \cdot \sum_{j', m_j'} \sigma_{j m_j \rightarrow j' m_j'} \\ & + N v_r \cdot \sum_{j', m_j'} \sigma_{j' m_j' \rightarrow j m_j} \cdot \rho_{m_j'} \\ & + c_{m_j} \end{aligned} \quad (3.17)$$

(Für schwere Alkali ist $\sigma_{j m_j \rightarrow j' m_j'} \approx 0$ für $j \neq j'$)

In (3.17) bedeuten:

τ : Lebensdauer des angeregten Zustands. $\tau = 2.7 \cdot 10^{-8}$ s für Rb

N : Teilchenzahldichte des Edelgases. $N = p/kT$

v_r : Relativgeschwindigkeit der Stoßpartner.

$$v_r = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \sqrt{kT} \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \quad \text{bei Annahme einer Maxwellvertlg.}$$

$\sigma_{j m_j \rightarrow j' m_j'}$: Wirkungsquerschnitt für den Übergang vom Zustand $|j m_j\rangle$ zum Zustand $|j' m_j'\rangle$

c_{m_j} : steht für die optische Anregung des Niveaus

Der 1. Term in Gl. (3.17) beschreibt die Verluste durch spontane Emission, der 2. die Verluste durch Stöße, der 3. die Gewinne durch Stöße und der 4. die Gewinne durch die optische Anregung des Niveaus.

Man schreibt sich nun die Bilanzgleichungen für jeden Zeemanterm einzeln auf und faßt sie gemäß der Gleichungen (3.7) zu Bilanzgleichungen für die ρ_{ij}^k zusammen. Grawert /53/ hat gezeigt, daß in Gasen mit isotroper Geschwindigkeitsverteilung aus Symmetriegründen einige der Wirkungsquerschnitte $\sigma_{j'm_j \rightarrow j'm_j'}$ gleich sind (siehe "große" Matrix in /53/). Dadurch lassen sich die Bilanzgleichungen zu sehr einfachen Bilanzgleichungen für die ρ_{ij}^k zusammenfassen. Besonders einfach ist dies für den $^2P_{1/2}$ -Zustand. Deshalb sei die Rechnung für diesen Fall hier gezeigt:

$$j = 1/2$$

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{112}}{dt} = & \frac{-\rho_{112}}{\tau} - N V_r \rho_{112} \cdot \sigma_{1/2 \ 1/2 \rightarrow 1/2 \ 1/2} \\ & + N V_r \rho_{-112} \sigma_{1/2 \ 1/2 \rightarrow 1/2 \ 1/2} + C_{112} \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{-112}}{dt} = & -\frac{\rho_{-112}}{\tau} - N V_r \rho_{-112} \sigma_{1/2 \ 1/2 \rightarrow 1/2 \ 1/2} \\ & + N V_r \rho_{112} \sigma_{1/2 \ 1/2 \rightarrow 1/2 \ 1/2} + C_{-112} \end{aligned}$$

Also:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_0^1}{dt} \propto \frac{d}{dt} (\rho_{112} - \rho_{-112}) = & -\frac{\rho_{112} - \rho_{-112}}{\tau} - N V_r (\rho_{112} \cdot 2 \sigma_{1/2 \ 1/2 \rightarrow 1/2 \ 1/2} \\ & - \rho_{-112} \cdot 2 \sigma_{1/2 \ 1/2 \rightarrow 1/2 \ 1/2}) + C_{112} - C_{-112} \end{aligned}$$

wegen $\sigma_{1/2 \ 1/2 \rightarrow 1/2 \ 1/2} = \sigma_{1/2 \ 1/2 \rightarrow 1/2 \ 1/2}$ folgt:

$$\frac{d\rho_0^1}{dt} = -\frac{\rho_0^1}{\tau} - N V_r \sigma_{j=1/2}^{(1)} \rho_0^1 + C_{j=1/2}^{(1)} \quad (3.19)$$

mit

$$\sigma_{1/2}^{(1)} = 2 \cdot \sigma_{1/2 \ 1/2 \rightarrow 1/2 \ 1/2}$$

Für den $^2P_{3/2}$ - Zustand geht die Rechnung ganz analog. Allgemein bekommt man also für die Relaxation der Tensorpolarisationen $\sum_o^k$ folgende Bilanzgleichungen:

$$\frac{d s_o^k}{dt} = -\frac{s_o^k}{\tau} - N v_r \sigma_j^{(k)} s_o^k + C_j^{(k)} \quad (3.20)$$

Diese Gleichung hat nur deshalb eine so einfache Form, weil in Gasen mit isotroper Geschwindigkeitsverteilung alle Geschwindigkeitskomponenten gleichermaßen berücksichtigt werden müssen (Integration über alle möglichen Lagen der Streuebene. Siehe dazu den Beweis in /7/ Kap. 1.2). (3.20) enthält nur s_o^k mit gleichem k. Das heißt, die Tensorpolarisationen verschiedener Stufen relaxieren unabhängig voneinander und können somit unabhängig voneinander gemessen werden. Durch Stöße kann ein alignment nicht in eine Dipolpolarisation umgewandelt werden und umgekehrt. Daß dies so ist, wurde bereits von Dyakonov u. Perel /27/ und von Omont /26/ bewiesen und ist auch in /7/ nochmals allgemein gezeigt worden.

Die in (3.20) auftretenden Wirkungsquerschnitte $\sigma_j^{(k)}$ hängen mit den Wirkungsquerschnitten $\sigma_{j' m_j' \rightarrow j'' m_j''}$ folgendermaßen zusammen (schwere Alkali):

$$\sigma_{1/2}^{(1)} = 2 \cdot \sigma_{1/2 \ 1/2 \rightarrow 1/2 \ -1/2}$$

$$\sigma_{3/2}^{(1)} = 4 \cdot \sigma_{3/2 \ 3/2 \rightarrow 3/2 \ -1/2} - 2 \cdot \sigma_{3/2 \ 3/2 \rightarrow 3/2 \ 1/2} + 2 \cdot \sigma_{3/2 \ 1/2 \rightarrow 3/2 \ -1/2} \quad (3.21)$$

$$\sigma_{3/2}^{(2)} = 2 \cdot \sigma_{3/2 \ 3/2 \rightarrow 3/2 \ 1/2} + 2 \cdot \sigma_{3/2 \ 3/2 \rightarrow 3/2 \ -1/2}$$

Für den im Experiment vorliegenden stationären Fall $\frac{d s_o^k}{dt} = 0$ folgt aus (3.20)

$$s_o^k = \frac{C_j^{(k)}}{\frac{1}{\tau} + N v_r \sigma_j^{(k)}} \quad (3.22)$$

oder

$$\frac{1}{s_o^k} = \frac{1}{\tau \cdot C_j^{(k)}} + N v_r \cdot \sigma_j^{(k)} \frac{1}{C_j^{(k)}}$$

Mit $N = p/kT$ und dem in 3.1 und 3.2 abgeleiteten Beziehungen

$$\rho_o^1 \propto I_r - I_e$$

$$\rho_o^2 \propto I_\sigma - I_\pi$$

folgt daraus:

$$\frac{1}{I_r - I_e} = A_j^{(1)} \frac{v_r \cdot \tau}{h \cdot T} \sigma_j^{(1)} \cdot p + A_j^{(1)} \quad j = 1/2, 3/2 \quad (3.23)$$

und

$$\frac{1}{I_\sigma - I_\pi} = A_{3/2}^{(2)} \frac{v_r \cdot \tau}{h \cdot T} \sigma_{3/2}^{(2)} \cdot p + A_{3/2}^{(2)} \quad (3.24)$$

Trägt man die Meßgrößen $\frac{1}{I_r - I_e}$ bzw. $\frac{1}{I_\sigma - I_\pi}$ gegen den Edelgasdruck auf, so erhält man eine Gerade mit der Steigung $S = A_j^{(h)} \cdot (v_r \cdot \tau / h T) \cdot \sigma_j^{(h)}$ und dem Achsenabschnitt $A = A_j^{(k)}$. Damit erhält man die Wirkungsquerschnitte aus:

$$\sigma_j^{(h)} = \frac{S}{A} \cdot \frac{h \cdot T}{v_r \cdot \tau} \quad (3.25)$$

3.4 Einfluß des Kernspins

Wir haben die Beschreibung der Stöße bisher stets in der Basis $|j m_j\rangle$ durchgeführt. Dies ist nur korrekt für Atome ohne Kernspin ($I = 0$).

Da die Rubidiumisotope ^{85}Rb und ^{87}Rb aber den Kernspin $I = 5/2$ und $I = 3/2$ haben, muß eine Hyperfeinstruktur der Zustände in die Betrachtung mit einbezogen und die Relaxationsprozesse in der Basis $|F m_F\rangle$

beschrieben werden. Interessiert man sich aber nur für die Relaxation des Hüllenspinsystems, muß der Einfluß der Hyperfeinstruktur theoretisch korrigiert werden. Es sind verschiedene Arbeiten über dieses Thema in

den letzten Jahren erschienen (Bulos u. Happer /54/, Elbel et.al. /29/
Papp u. Franz /31/, Franz u. Franz /55/, Omont u. Meunier /56/,
Okunevich u. Perel /57/, Lewis u. Wheeler /58/).

Der Grundgedanke zum Verständnis des Einflusses des Kernspins
bei den Stoßprozessen ist der, daß die Dauer eines Stoßes wesentlich kürzer
ist als die Zeit für eine Hyperfeinperiode (eine Drehung von $\vec{I}$ und $\vec{J}$
um $\vec{F}$). So kann man sagen, daß Kernspin und Elektronenspinsystem während
des Stoßes entkoppelt sind. Während $\vec{J}$ durch den Stoß umorientiert wird,
bleibt $\vec{I}$ in der alten Richtung stehen. Koppeln nun $\vec{J}$ und $\vec{I}$ zwischen den
Stößen auf Grund der Hyperfeinwechselwirkung wieder aneinander zu $\vec{F}$, so
wird $\vec{F}$ auf Grund der Orientierung von $\vec{I}$ weiterhin - wenn auch schwächer als
vor dem Stoß - entlang der alten Richtung orientiert sein. Die Anwesenheit
des Kernspins führt also zu einer Abschwächung der Desorientierung und
damit zu einer Verkleinerung der gemessenen Wirkungsquerschnitte. Man
kann sagen, daß der Kernspin als eine Art "Schwungrad" oder als "Puffer"
für die Orientierung in Erscheinung tritt. (Die beschriebene Näherung
wird in der Literatur als " nuclear decoupling approximation" bezeichnet.)

Experimentelle Werte an Systemen mit $I \neq 0$ müssen entsprechend
korrigiert werden. Zwar ist nach wie vor $I_r - I_1 \propto \langle J_z \rangle$ und
 $I_\sigma - I_\pi \propto \langle J_z^2 - 1/3 J^2 \rangle$, doch relaxieren diese Größen jetzt nicht
mehr mit einer einzigen Zeitkonstanten γ^k sondern enthalten im allgemeinen
 $\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3$, siehe z.B. /31/. Die Abtragung von $1/\gamma_0^k$ gegen
den Fremdgasdruck gibt dann keine Gerade mehr.

In theoretischen Arbeiten wurden Faktoren berechnet, mit denen die
experimentellen Werte korrigiert werden (/54/). Diese Berechnungen
stützen sich aber auf bestimmte Stoßmodelle - z.B. isotrope Orientierung
von $\vec{J}$ nach dem Stoß: " J - randomisation" - Modell - und machen
Annahmen über die optisch erzeugte Besetzung der $|F m_F\rangle$ - Zustände.
(Für $J = I = 3/2$ ergibt das J - randomisation - Modell z.B.
 $\sigma_{3/2}^{(1)}(I = 0) / \sigma_{3/2}^{(1)}(I = 3/2) = 0.5$). In einer neuen Arbeit von
Lewis und Wheeler /58/ sind die Korrekturfaktoren für $I=3/2, 5/2, 7/2$
für verschiedene Alkali mit einer allgemeineren Theorie berechnet
worden, die kein spezielles Stoßmodell annimmt. Aber es wurde angenommen,
daß die Anregung mit weißem Licht erfolgen soll, was im Experiment i. allg.
nicht gut verwirklicht ist.

Zwei gängige Verfahren zur Messung von Depolarisationswirkungsquerschnitten sind das D_2 - Pumpen und die Ausnutzung des Hanle Effekts, das heißt, Messungen der Druckverbreiterung von Hanlekurven. Für Rubidium wurden D_2 - Pump - Messungen von Papp u. Franz /31/ und Zhitnikov et.al. /16/ und Hanle Effekt Messungen von Gallagher /14/ durchgeführt. Beide Methoden benutzen ein niedriges Magnetfeld, in dem die Hyperfeinwechselwirkung wirksam werden kann. Die Messergebnisse müssen deshalb mit Hilfe theoretischer Überlegungen auf den Fall $I = 0$ reduziert werden. Sie sind damit nicht unabhängig vom Stoßmodell und können somit nicht zum Test dieser Modelle verwendet werden (z.B. Verhältnis $\sigma(2) / \sigma(1)$), sondern geben nur Auskunft über die Stärke der Stoßwechselwirkung.^{3/2} Dies ist ein entscheidender Nachteil der genannten Methoden.

Deshalb führen wir unsere Experimente in einem Magnetfeld H_0 durch, das groß genug ist, um Kern - und Hüllendrehimpuls voneinander abzukoppeln (Paschen Back Gebiet der Hyperfeinstruktur). $\vec{I}$ und $\vec{J}$ koppeln dann nicht mehr zu $\vec{F}$ sondern einzeln an H_0 . Damit wird der Kernspin nicht mehr über die Hyperfeinwechselwirkung orientiert und hat daher keinen Einfluß mehr auf die Stoßprozesse. Somit hat man den Fall $I = 0$ "simuliert", kann also eine $|j m_j\rangle$ Basis benutzen, wie es in den Abschnitten 2. und 3.1 - 3.3 geschehen ist. Die dort abgeleiteten Beziehungen sind unter den gewählten experimentellen Bedingungen also gültig.

3.5 Vorteile der Meßmethode

Der wichtigste Vorteil - das Aufbrechen der Hyperfeinstruktur durch Anlegen eines genügend hohen Magnetfeldes - wurde bereits im vorher - gehenden Abschnitt beschrieben.

Ein weiterer großer Vorteil besteht darin, daß an die Anregungsbedingungen keinerlei Anforderungen gestellt werden müssen. Die Anregungsterme c_{m_j} und alle Proportionalitätskonstanten stehen im Achsenabschnitt $A_j^{(k)}$ der Meßgeraden. Da der gleiche Faktor auch in der Steigung steht, kürzt er sich bei der Berechnung des Wirkungsquerschnitts (Gl.(3.25)) heraus und muß somit nicht bekannt sein. Die einzige Forderung ist, daß die Anregungsbedingungen sich nicht mit dem Edelgasdruck verändern.

Dies wäre der Fall, wenn der Grundzustand optisch gepumpt würde, da Größe und Vorzeichen des durch optisches Pumpen erzeugten Polarisationsgrades vom Edelgasdruck abhängen. Bei Stößen mit der Glaswand wird eine eventuelle Polarisation des Grundzustandes sehr rasch zerstört. Um eine rasche Diffusion der Alkaliatome zu den Zellwänden zu ermöglichen, wurde ca. 1 cm hinter der Glaswand beobachtet bzw. bei den Temperaturabhängigkeitsmessungen eine kleine Resonanzzelle $\phi = 2$ cm benutzt. Außerdem wurde der Edelgasdruck relativ niedrig gehalten ($p \leq 3$ Torr), um eine rasche Diffusion zu den Zellwänden zu ermöglichen.

Druckverbreiterungen des Absorptionsspektrums spielen bei den kleinen Edelgasdrücken noch keine Rolle, sondern werden erst im Bereich von etwa 1 bar wichtig.

Eine zeitliche Veränderung der Anregungsbedingungen wurde durch gute Brenneigenschaften der Lampe weitgehend ausgeschlossen.

Um zusammenzufassen, die Messungen mit abgekoppeltem Kernspin im hohen Magnetfeld liefern Meßergebnisse für $\sigma_{1/2}^{(1)}$, $\sigma_{3/2}^{(1)}$ und $\sigma_{3/2}^{(2)}$, die frei von irgendwelchen theoretischen Annahmen sind (mit Ausnahme der Symmetrieprinzipien, Unabhängigkeit der Relaxation der Tensorpolarisationen verschiedener Stufe). Die Meßwerte lassen sich also zum Test verschiedener Theorien verwenden. Die Anregungsbedingungen, d.h. Linienprofil der Lampe und Polarisationsgrad des eingestrahlten Lichts, müssen für die Auswertung der Messungen nicht bekannt sein, sondern müssen nur während einer Druckvariation konstant sein.

Teil II. Messungen von $\sigma_{1/2}^{(1)}$ und $\sigma_{3/2}^{(1)}$ bei 44°C für He, Ne, Ar, Kr und Xe

1. Der Versuchsaufbau

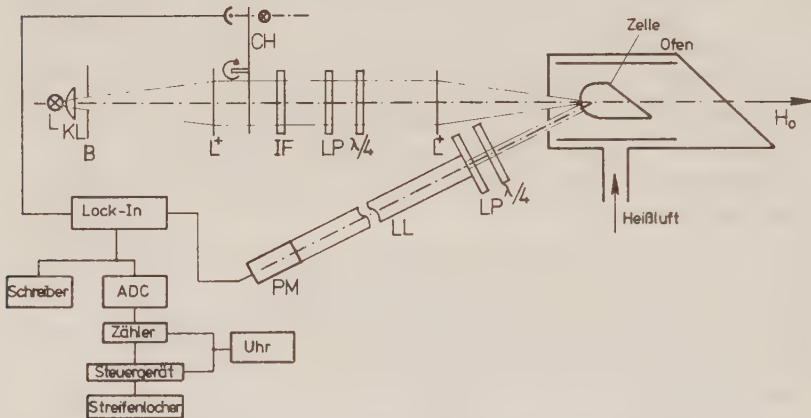


Abb.6: Versuchsaufbau für die Messung von $\sigma_{1/2}^{(1)}$ und $\sigma_{3/2}^{(1)}$ bei 44°C

Der in Abb.6 skizzierte Versuchsaufbau erfüllt die in Kap. I 3.1 - 3.5 geforderten Bedingungen.

Das Licht einer Rubidium - Hochfrequenzlampe wird mit einer Linse KL kollimiert, mit der variablen Lochblende B begrenzt und durchsetzt als paralleles Lichtbündel das Rubidium - Interferenzfilter (D_1 oder D_2 umstellbar). Es wird dann mit Hilfe eines Linearpolarisators und eines $\lambda/4$ - Plättchens zirkular polarisiert. Schließlich wird es in die Resonanzzelle fokussiert (Brennpunkt 1-2cm hinter der Zellwand). Unter einem Winkel von 30° wird das Fluoreszenzlicht mit Hilfe eines $\lambda/4$ - Plättchens und eines Linearpolarisators polarisationsempfindlich nachgewiesen. Das Signal des Photomultipliers PM, der auf Grund eines zwischengeschalteten Lichtleiters etwa 70cm vom Magnetfeld H_0 entfernt steht, wird mit einem Lock-In Verstärker gemessen und als Gleichstromsignal auf einem Schreiber aufgezeichnet. Gleichzeitig wird es mit einem ADC digitalisiert, über einen genau einstellbaren Zeitraum gezählt und auf Lochstreifen ausgegeben. Zur Ermöglichung des Lock-In Verfahrens wird der Anregungsstrahlengang mit dem Chopperrad CH gepulst. Das $\lambda/4$ - Plättchen im Beobachtungsstrahlengang kann in die Stellung rechtszirkular und in die dazu um 90° verdrehte Stellung linkszirkular gebracht werden.

So kann man I_r und I_l abwechselnd messen. Abb. 7 zeigt als Beispiel das Meßsignal für die D_1 - und D_2 - Linie bei zwei verschiedenen Edelgasdrücken.

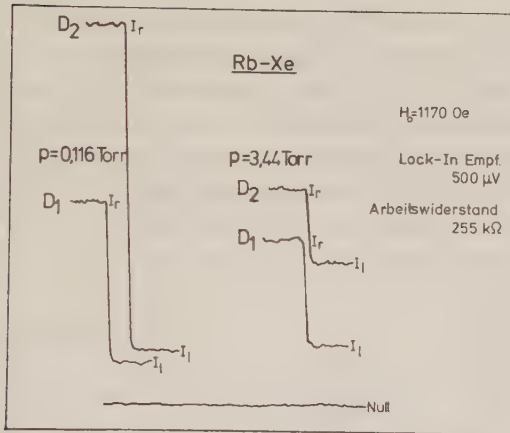


Abb. 7: Fluoreszenzlichtsignale I_r und I_l für die D_1 - und D_2 - Linien bei $H_0 = 1170 \text{ Oe}$ und zwei verschiedenen Xenondrücken.

Schon an dieser Abbildung sieht man deutlich, daß die Differenz $I_r - I_l$ mit wachsendem Fremdgasdruck abnimmt, daß die Stöße also zu einer Depolarisation führen.

1.1 Bestandteile der Apparatur

1.1.1 Die Rubidium - Spektrallampe

Als Lichtquelle wurde dieselbe Rb - Hochfrequenzlampe benutzt wie in /7/. Sie besteht im wesentlichen aus einer kleinen mit Rubidium natürlicher Isotopenzusammensetzung und wenigen Torr Argon gefüllten Glaskugel ($\varnothing = 1 \text{ cm}$), die sich in der Schwingspule eines Senders befindet. Dieser Lampentyp wurde von Brewer /59/ vorgeschlagen. Um einen möglichst günstigen und stabilen Brennzustand einstellen zu können, wurde die Lampe thermostatisiert. Dazu wurde die Kugel in einen Kühler aus Duranglas gebracht, durch den von einem Haake Umwälzthermostat Öl (AP 200) gepumpt und auf $\pm 0,1^\circ \text{C}$ auf konstanter Temperatur gehalten wurde. Der Kühler wurde von Schneider konstruiert und ist in /6/ ausführlich beschrieben. Er ist so gebaut,

daß vor der Kugel kein Öl vorbeiströmt (dies würde zu einem starken Rauschen der Lampe führen). Die Kugel befindet sich in einem stehenden Ölbad, das von dem außen herumströmenden Öl temperiert wird.

Diese Rb - Lampe hat sich bisher ausgezeichnet bewährt. Da Rubidium im Gegensatz zu Natrium kaum von den Glaswänden absorbiert wird, haben solche Lampen eine sehr hohe Lebensdauer. Die für die vorliegenden Messungen benutzte Lampe ist jetzt seit 3 1/2 Jahren regelmäßig in Betrieb, ohne bisher irgendwelche Veränderungen zu zeigen.

Um die günstigste Betriebstemperatur der Lampe festzustellen, wurden Gesamtintensität und Polarisationsgrad für die D_2 - Linie (gemessen wurde das Fluoreszenzlicht) in Abhängigkeit von der Lampentemperatur gemessen (Abb.8). Danach wurde eine Betriebstemperatur von $114,5^{\circ}\text{C}$ eingestellt.

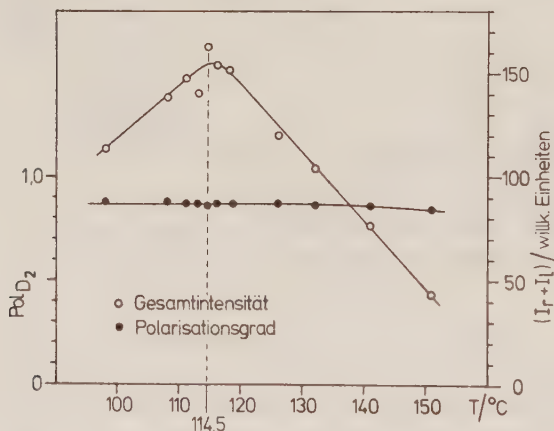


Abb.8: Gesamtintensität und Polarisationsgrad der D_2 - Linie bei $H_0 = 1015 \text{ Oe}$, $p = 0$ in Abhängigkeit von der Lampentemperatur.

Um festzustellen, ob kleinere Temperaturschwankungen der Lampe den Polarisationsgrad des Dampfes verändern, wurde der Polarisationsgrad für 5 Temperaturen im Bereich $111,5^{\circ}\text{C}$ bis $124,5^{\circ}\text{C}$ gemessen. Im Rahmen der Meßgenauigkeit waren die Polarisationsgrade in diesem Bereich gleich.

Sehr selten kam es vor, daß während einer Meßreihe die Lampe ihren Brennzustand veränderte und dadurch der Polarisationsgrad geändert wurde. Da sich dieser Zustand nicht durch eine andere Abstimmung des Senders rückgängig machen ließ, mußte in solchen Fällen die Messung abgebrochen werden.

1.1.2 Der Chopper

Das zweiflügelige Chopperrad war auf der Achse eines Valvo Synchron - motors befestigt, der mit einem RC - Oszillator (Type RCO-6K, Firma Oltronix) veränderlicher Frequenz angetrieben wurde.

Das Chopperrad modulierte das Licht der Rb - Lampe hell - dunkel und erzeugte gleichzeitig ein dazu phasensynchrones Rechtecksignal mit Hilfe einer Glühlampe und einer Photodiode. Dieses Signal wurde als Referenzsignal an den Lock-In Verstärker gegeben. Als Choppfrequenz wurde 21 Hz gewählt. Bei dieser Frequenz war das Signal/Rausch Verhältnis optimal.

1.1.3 Interferenzfilter

Zur Trennung der D - Linien wurden zwei Interferenzfilter ($\varnothing = 5\text{cm}$, Fa. Corion Instruments) benutzt. Die Durchlasskurven der Filter werden in Abb. 9 wiedergegeben.

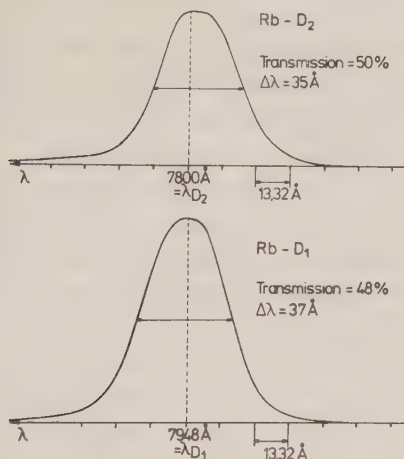


Abb.9: Durchlasskurven der Interferenzfilter für die Rb - D - Linien.

Eine Messung zeigte, daß das Verhältnis der von beiden Filtern (D₁ und D₂ - Filter hintereinandergeschaltet) durchgelassenen Licht - stromstärke zu der nur vom D₂ - Filter durchgelassenen etwa $4 \cdot 10^{-5}$ beträgt. Ein so kleiner Fremdlichtanteil macht sich bei den Messungen nicht bemerkbar, da er weit unterhalb der Meßgenauigkeit liegt. Man kann

also sagen, daß die Trennung der Rubidium D-Linien mit den verwendeten Filtern vollständig war.

Die beiden Interferenzfilter waren zusammen in einer drehbaren Halterung montiert, die es erlaubte, abwechselnd das eine oder das andere Filter in den Strahlengang zu bringen, ohne dabei die Geometrie (evtl. vorhandener kleiner Winkel zum Strahlengang) zu verändern.

1.1.4 Die Zirkularpolarisatoren

Der Zirkularpolarisator im Anregungsstrahlengang bestand aus einem Linearpolarisator ($\varnothing = 43\text{mm}$, KS-MIK der Firma Käsemann) und einem auf die Rb-Wellenlänge $7800 \text{ \AA}$ bzw. $7948 \text{ \AA}$ abgestimmten $\lambda/4$ -Plättchen ($\varnothing = 40\text{mm}$). Im Beobachtungsstrahlengang wurde ein kleineres $\lambda/4$ -Plättchen ($\varnothing = 20\text{mm}$) und ein Linearpolarisator desselben Typs wie dem oben genannten benutzt. Ein Test zeigte, daß die Linearpolarisatoren bei der benutzten Wellenlänge in gekreuzter Stellung weniger als 0,2% des Lichtes durchließen, das in paralleler Stellung durchgelassen wurde.

Die Justierung der Zirkularpolarisatoren erfolgte mit Rubidium D_1 - bzw. D_2 -Licht. Zum Nachweis wurde hinter den Zirkularpolarisator ein Linearpolarisator gestellt und das Signal mit einer Photodiode 8PY 11 nachgewiesen und mit dem Lock - In Verstärker gemessen. Das Licht ist dann optimal zirkular polarisiert, wenn beim Drehen des Linearpolarisators keine Helligkeitsschwankungen mehr auftreten. Eine Schwierigkeit bestand darin, den Strahlengang so zu justieren, daß der Nachweis ohne den Zirkularpolarisator polarisationsunempfindlich war. Das war nur durch sehr sorgfältiges Justieren des Strahlengangs und durch Verwenden einer ebenen Photodiode ohne vorgesetzte Glasscheibe möglich. Die bei Drehung des Linearpolarisators bei optimal justiertem Zirkularpolarisator auftretenden Helligkeitsschwankungen betrugen immer noch gut 5% des Gesamtsignals, d.h. es waren auch Anteile der anderen Polarisationsrichtung vorhanden. Beim Hintereinanderschalten beider Zirkularpolarisatoren (der zweite als Analysator) ergab sich ein Trennvermögen von $\leq 1\%$.

Es wurde darauf geachtet, daß die Zirkularpolarisatoren in den beiden Meßstellungen I_r und I_l symmetrisch arbeiteten (d.h. gleiches Signal bei unpolarisiertem Licht). Das war am besten gewährleistet, wenn man zur Trennung der rechts - und linkszirkularen Fluoreszenzlicht -

komponente des $\lambda/4$ -Plättchen im Beobachtungsstrahlengang verdrehte. Dies empfiehlt sich schon deshalb, weil dann die Anregungsbedingungen immer gleich bleiben und weil der Photomultiplier, der - auch wegen des vorgeschalteten Lichtleiters - immer etwas polarisationsempfindlich nachweist, dann immer Licht der gleichen Polarisationsrichtung erhält. Dadurch werden systematische Fehler vermieden.

1.1.5 Photomultiplier und Lichtleiter

Damit der Photomultiplier hinreichend weit (etwa 70 cm) vom Magnetfeld H_0 entfernt stehen konnte, befand sich hinter dem Zirkularanalysator ein 2 cm dicker Plexiglasstab mit polierten Endflächen, der bis an den Photomultiplier heranreichte. Eine Zeitlang wurde auch mit einem besseren, gekauften Quarzlichtleiter gearbeitet ($\phi \approx 5$ mm). Die besseren optischen Eigenschaften dieses Lichtleiters wurden aber durch den kleineren Querschnitt wieder zunichte gemacht, so daß das Gesamtsignal sogar etwas kleiner war als mit dem Plexiglasstab.

Type des verwendeten Photomultipliers: 150 CVP, Valvo

Daten nach Valvo-Handbuch: Ag O Cs - Kathode,

Maximum der spektralen Empfindlichkeit
bei 800 ± 100 nm. 3 mA/W

Dunkelstrom bei 25°C : $I \leq 0,5 \cdot 10^{-12}$ A/cm²

Der hohe Dunkelstrom erfordert eine Kühlung des PM. Das eigens dazu entwickelte Kühlgehäuse aus Edelstahl zur Kühlung mit flüssigem Stickstoff ist in /7/ ausführlich beschrieben worden und hat sich sehr gut bewährt.

Obwohl der PM vom Feld H_0 relativ weit entfernt stand und mit μ -Metall abgeschirmt war, beeinflusste das Feld doch das Meßsignal. Zwar war die Proportionalität der Anzeige gewahrt, wie ein Test zeigte, doch verkleinerte das Restfeld am PM das Signal um einen Faktor 2. Deshalb wurde zur Kompensation des Restfeldes der PM in ein Helmholtz - spulenpaar gestellt. Bei einem Teil der Messungen stand zur Versorgung dieser Spulen ein Netzgerät zur Verfügung, mit dem der Spulenstrom so eingestellt wurde, daß der PM ein maximales Signal lieferte. Bei anderen Messungen wurden geeignet dimensionierte Spulen mit dem Hauptfeld in Reihe geschaltet. Das hat den Vorteil, daß die Kompensation für jedes eingestellte Feld H_0 richtig ist.

1.1.6 Magnetfeld

Zur Erzeugung des Magnetfeldes H_0 wurden dieselben Spulen wie in /7/ benutzt. Mit den zwei konzentrisch aufgestellten Helmholtzspulenpaaren konnte ein Feld bis zu 1200 Oe eingestellt werden. Die Homogenität des Feldes ist aus Abb.10 ersichtlich.

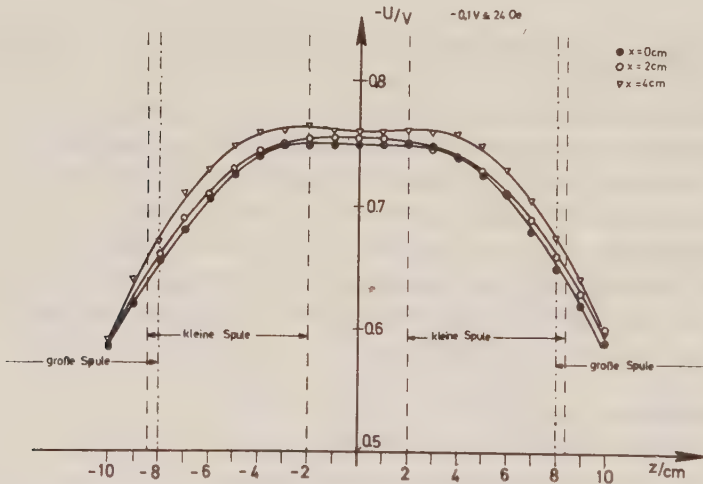


Abb.10: Abhängigkeit der Magnetfeldstärke vom Ort (x, z) . Verändert wurde jeweils z bei festgehaltenem x . Kleine Spulen 120 Oe, große Spulen 60 Oe.

Daten des großen Spulenpaares: $n = 350/\text{Spule}$

$\varnothing_{\text{innen}} = 38\text{cm}$

$\varnothing_{\text{außen}} = 54\text{cm}$

Dicke der Spule = 7,5cm

Daten des kleinen Spulenpaares: $n = 1636/\text{Spule}$

$\varnothing_{\text{innen}} = 18\text{cm}$

$\varnothing_{\text{außen}} = 28,4\text{cm}$

Dicke = 6,5cm

Wie in Kapitel I 3.4 erklärt wurde, wird das Magnetfeld benötigt, um den Kernspin im 2P - Niveau abzukoppeln. Die Größe des dazu erforderlichen

Feldes kann man nach Kopfermann /60/ abschätzen. Danach ist der Kernspin abgekoppelt, wenn

$$H_0 \gg \frac{\mu_I}{\mu_B} \bar{H}_0 =: H_{\text{Grenz}} \quad (1.1)$$

gilt. $\bar{H}_0$ ist das vom Elektron am Kernort erzeugte Magnetfeld, also:

$$\mu_I \cdot \bar{H}_0 = A_J \cdot I \cdot \vec{J} \quad (1.2)$$

Mit $A_{3/2} \hat{=} 0,834$ mK und $I = 5/2$ (für das am häufigsten vorkommende Isotop ^{85}Rb) und $J = 3/2$ erhält man:

$$H_{\text{Grenz}}(^2P_{3/2}) = 64 \text{ Oe} \quad (1.3)$$

Mit $A_{1/2} \hat{=} 3,98$ mK und $J = 1/2$ erhält man:

$$H_{\text{Grenz}}(^2P_{1/2}) = 103 \text{ Oe} \quad (1.4)$$

Das Feld von 1100 Oe, bei dem gemessen wurde, ist also etwa 10 mal so groß wie das Grenzfeld im $^2P_{1/2}$ - Zustand. Abb.11 zeigt den Polarisationsgrad in Abhängigkeit vom Magnetfeld für die D_1 - und die D_2 - Linie, gemessen mit vollständig justierter Apparatur.

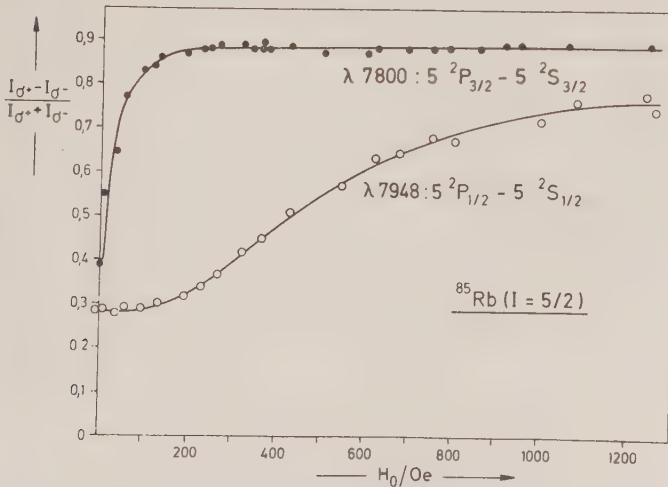


Abb.11: Abhängigkeit des Polarisationsgrades vom Magnetfeld.

Durch das Vorhandensein der Hyperfeinstruktur sind die Polarisationsgrade ohne Magnetfeld relativ klein und steigen beim Abkoppeln des Kernspins. Aus dieser Messung würde man entnehmen, daß die Abkopplung des Kernspins für den $^2P_{3/2}$ - Zustand bei ca. 300 Oe vollständig erreicht ist. Für den $^2P_{1/2}$ - Zustand ist die Abkopplung bei 1300 Oe gerade eben erreicht. Messungen der Wirkungsquerschnitte $\sigma_{1/2}^{(1)}$ und $\sigma_{3/2}^{(1)}$ bei verschiedenen Feldstärken zeigten aber, daß $\sigma_{1/2}^{(1)}$ bereits oberhalb von 200 Oe unabhängig vom Feld ist. $\sigma_{3/2}^{(1)}$ ist für $H_D \geq 100$ Oe feldunabhängig. In Abb.11 muß man auch berücksichtigen, daß die Anregungsbedingungen nicht für alle Feldstärken gleich sind, weil nur die Zelle im Magnetfeld steht (enthält ^{85}Rb), die Lampe aber nicht (enthält natürliches Rb). Dies beeinflußt natürlich die Polarisation des Dampfes, so daß aus Abb.11 nicht genau entnommen werden kann, wann die Abkopplung des Kernspins vollständig ist. Die Messung der Wirkungsquerschnitte in Abhängigkeit vom Feld ist dafür sicher ein besserer Test und zeigte, daß in beiden Zuständen Kern- und Hüllenspin bei 1000 Oe entkoppelt sind.

1.1.7 Resonanzzelle, Ofen, Vakuumapparat

Die Form der Resonanzzelle ist aus Abb.12 ersichtlich. Sie wurde in der glastechnischen Werkstatt des Physikalischen Instituts Marburg aus Duranglas gefertigt.

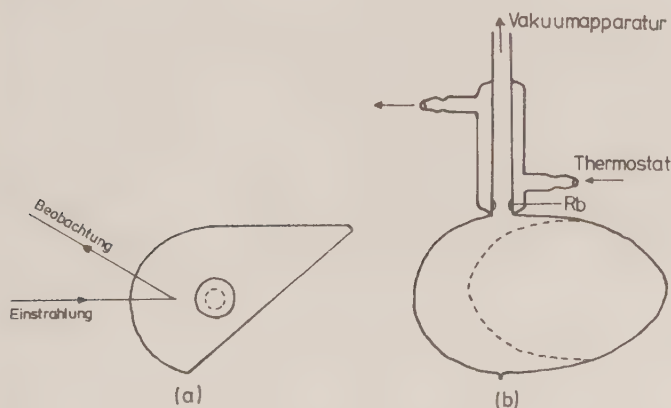


Abb.12: Resonanzzelle zur Beobachtung unter $\alpha = 30^\circ$. Mit Seitenarm. Seitenansicht (b) und Aufsicht (a).

Die schräg aufgeglaste Rückwand der Zelle soll verhindern, daß Teile des eingestrahnten Lichts zur Beobachtung gelangen. Die Vermeidung solcher Reflexe ist sehr wichtig, wie wir im nächsten Abschnitt noch sehen werden.

Der Seitenarm der Zelle ist doppelwandig ausgeführt, so daß von einem Thermostaten eine Kühlflüssigkeit (destilliertes Wasser) hindurch gepumpt werden konnte. Der Seitenarm wurde so auf etwa 20°C (oder der zur Einstellung des Dampfdrucks nötigen Temperatur, siehe Abschnitt 1.2.2) $\pm 0,1^{\circ}\text{C}$ thermostatisiert. In den Seitenarm der Zelle wurde isotopenreines ^{85}Rb mit der in /7/ ausführlich beschriebenen Methode eindestilliert. (Für die Messungen könnte man auch natürliches Rubidium verwenden, da der Kernspin ja abgekoppelt wird. ^{85}Rb wurde benutzt, weil ursprünglich beabsichtigt war, D_2 -Pump Messungen durchzuführen).

Die Zelle war mit einer Vakuumapparatur aus Duranglas verbunden. Diese gestattete es, die Zelle auf 10^{-6} Torr auszupumpen und dann eine definierte Menge Edelgas schrittweise einzulassen. Der Druck des Edelgases wurde mit einem McLeod Manometer gemessen.

Die Zelle befand sich in einem zylindrischen Ofen aus Pertinax. ($\varnothing=15,5\text{cm}$). Der obere Teil des Pertinaxrohres konnte zum Einstufen der Zelle abgenommen werden. Auf die Frontplatte war in der Mitte ein Fenster für das einfallende Licht aufgeklebt und seitlich davon war ein Loch ($\varnothing=1\text{cm}$) für die Beobachtung gelassen worden. Zur Vermeidung von Reflexen war die Rückwand des Ofens schräg gestellt, und der Ofen wurde auf der Innenseite geschwärzt. Geheizt wurde der Ofen von unten mit einem Warmluftgebläse.

Zur Messung der Zelltemperatur waren auf die Zelle an zwei Stellen (seitlich in der Mitte und unten) Thermolemente aufgekittet (NiCr - Konstantan, Fa. Degussa). Die Zelltemperatur wurde während der ganzen Messung mit einem 4-Kanal x-t Schreiber (Fa. Linseis) mitgeschrieben. Zur Auswertung wurde der Mittelwert der gemessenen Temperaturen benutzt ($T \approx 44^{\circ}\text{C}$). Der Temperaturgradient über der Zelle betrug etwa 5°C , die Unsicherheit des Mittelwertes während einer Messung etwa $1 - 2^{\circ}\text{C}$. Die Temperaturunsicherheit wurde bei der Auswertung der Messungen berücksichtigt.

1.2 Zusammenbau und Justierung der Apparatur, vorbereitende Messungen

Die Apparatur wurde auf ein eigens dazu konstruiertes Gestell aus Holz und Aluminium montiert. Der wichtigste Mittelteil des Gestells diente zur Aufnahme der Spulen, des Ofens und der Resonanzzelle. Die Auflagebacken für beide Spulenpaare konnten über eine Grob- und eine Feineinstellung in der Höhe verstellt werden. Dies ermöglichte eine schnelle und genaue Justierung der Spulen. Damit der Experimentiertisch auch noch für weitere Experimente verwendet werden kann, wurde er möglichst variabel gehalten. Z.B. kann der Abstand der Spulenbacken so weit vergrößert werden, daß Spulen bis zu einem Meter Durchmesser darauf Platz haben. Die Seitenteile des Tisches, die zur Aufnahme der optischen Bänke dienen, sind mit dem Mittelteil nur verschraubt und können somit nach Belieben ausgewechselt werden. Die Zusatzgeräte, wie Thermostat, Netzgeräte usw. standen auf Tischen unter den Seitenteilen, ohne diese zu berühren, so daß kaum Schwingungen durch diese Geräte auf den Versuchsaufbau übertragen werden konnten. Für die ersten Messungen waren die optischen Geräte auf optische Bänke aus Holz montiert, später auf optische Bänke aus Aluminium (Fa. Spindler & Hoyer), was die Justierung vereinfachte.

1.2.1 Strahlengang und Einfluß von Reflexen auf die Messungen

Wie bereits kurz erklärt wurde, war der Anregungsstrahlengang so justiert, daß das Chopperrad, die Interferenzfilter und der Zirkularpolarisator im parallelen Strahlengang standen. Dann wurde das Licht in die Zelle 1 - 2cm hinter die Zellwand fokussiert. Nun mußte das Resonanzlicht unter einem Winkel von 30° beobachtet werden. Damit kein Licht von der Vorderseite der Zelle direkt in den Beobachtungsstrahlengang hinein - reflektiert wird (was bei einem so kleinen Winkel und der Bedingung, daß der Beobachtungspunkt nicht mehr als 1,5cm hinter der Zellwand liegt, leicht möglich ist), wurde zur Beobachtung des Signals ein Röhrchen ($\varnothing=8\text{mm}$) aus mattschwarzer Pappe bis dicht an die Zellwand herangeführt und reichte bis an den Zirkularanalysator. Dadurch wird gleichzeitig der zur Beobachtung gelangende Raumwinkel stark eingegrenzt. Zelle, Strahlengang und Ofenrückwand mußten so justiert werden, daß möglichst wenig Licht von

der Zelle oder dem Ofen in den Beobachtungsstrahlengang reflektiert wurde. Größere Reflexe verfälschen nämlich die zu messenden Wirkungsquerschnitte. Nimmt man an, daß bei der Zirkularanalysatorstellung I_r ein Reflex R_r und bei der Stellung I_l ein Reflex R_l gemessen wird, so ist:

$$I_r' = I_r + R_r \quad I_l' = I_l + R_l$$

$$\Rightarrow \frac{I_r' - I_l'}{I_r' + I_l'} = \frac{\frac{I_r - I_l}{I_r + I_l} + \frac{R_r - R_l}{I_r + I_l}}{1 + \frac{R_r + R_l}{I_r + I_l}}$$

Also:

$$Pol = \frac{Pol^0 + \frac{R_r - R_l}{I_{ges}}}{1 + \frac{R_r + R_l}{I_{ges}}} \quad (1.5)$$

Der wahre Polarisationsgrad des Dampfes Pol^0 wird demnach durch die Reflexe verfälscht und zwar umso mehr, je größer sie sind und je größer ihr Polarisationsgrad ist.

Bei bekannter Größenordnung der zu messenden Wirkungsquerschnitte kann man abschätzen, daß ein Reflex von $(R_r + R_l) = 5\%$ des Signals $(I_r + I_l)$ mit einem Polarisationsgrad von $(R_r - R_l)/(R_r + R_l) = 0,5$ den Wirkungsquerschnitt $\sigma_{1/2}^{(1)}$ für Rb - Xe Stöße um 7% verkleinern würde. Es wurde abgeschätzt, daß der Reflex weniger als 1% der Gesamtintensität ausmachen muß, damit der Polarisationsgrad um weniger als 0,5% verfälscht wird (mit $Pol^0 = 0,7$ und $Pol_{reflex} = 0,5$). Der statistische Fehler bei der Messung von Pol liegt zwischen 1% und 2%.

Die Reflexe kann man auf verschiedene Weisen messen: Für einen ersten groben Test wurde statt der Rubidiumlampe eine Natriumlampe benutzt. Man justiert dann auf minimales Signal. Dieses Verfahren ist besonders nützlich zum Auffinden von "optischen Undichtigkeiten" im Beobachtungsstrahlengang (dieser war ganz mit schwarzer Pappe und schwarzem Stoff abgedeckt). Man bekommt daraus aber keine Aussage über die absolute Größe der Reflexe, weil zum Einen die Justierung mit der anderen Lampe nie genau der mit der Rubidiumlampe entspricht, zum Anderen die Natriumlampe eine andere Helligkeit und der Photomultiplier eine andere Nachweisempfindlichkeit bei dieser Wellenlänge hat.

Eine weitere Methode, die öfter benutzt wurde, ist, den Seitenarm der

Zelle möglichst weit herunterzukühlen und nachzuprüfen, ob die Abnahme der Intensität mit der Temperatur der Rubidium - Dampfdruckkurve entspricht. Diese Methode ist aber ziemlich ungenau, da die im Thermostaten oder außen am Seitenarm gemessene Temperatur nie genau der wahren Temperatur des Rb - Spiegels entspricht. Mit dem zunächst nur zur Verfügung stehenden Thermostaten konnte der Seitenarm auch nur auf minimal 0°C abgekühlt werden. Bei dieser Temperatur ist die Fluoreszenzlichtintensität noch so hoch, daß die Reflexe davon nicht gut unterschieden werden können. Deshalb wurde der Seitenarm von außen mit festem CO_2 gekühlt. Der Strahlengang wurde dann so justiert, daß das dann verbleibende Signal weniger als 1% des Meßsignals ausmachte.

In späteren Versuchen (Teil III. Messung der Temperaturabhängigkeit) stand für die Thermostatisierung des Seitenarms ein Kryostat zur Verfügung, mit dem bis auf -20°C gekühlt werden konnte. Da der Polarisationsgrad der Reflexe im Gegensatz zum Meßsignal nicht vom Magnetfeld abhängt, kann man nachprüfen, ob die bei -20°C verbleibende kleine Restintensität durch Reflexe verursacht wird oder nicht. Zu diesem Zweck wurde die Abhängigkeit des Polarisationsgrades von der Gesamtintensität (Seitenarmtemperatur) bei den Feldstärken $H_0 = 0$ und $H_0 = 1000$ Oe gemessen. Abb.13 zeigt das Ergebnis einer solchen Messung, bei der ein relativ großer Reflex von 7% vorhanden war. Gemessen wurde mit der D_1 -Linie.

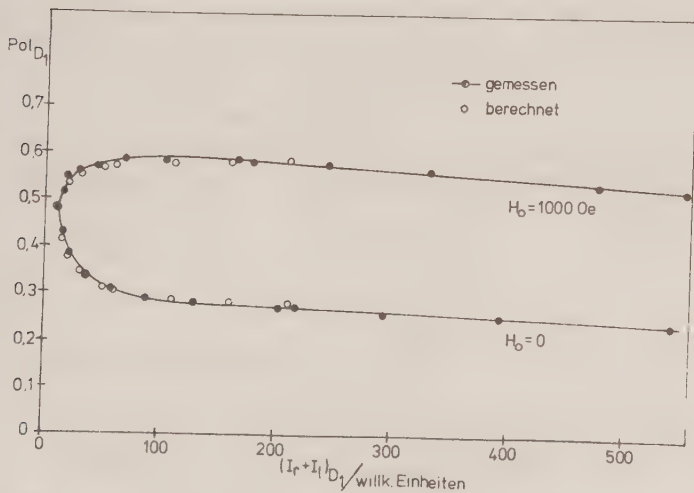


Abb.13: Abhängigkeit des Polarisationsgrades (D_1) von der Gesamtintensität mit und ohne Magnetfeld bei Anwesenheit von Reflexen (7%).

Die theoretischen Werte in Abb.13 sind mit Gl.(1.5) berechnet worden. Man bekommt eine ganz gute Anpassung an die Meßkurve mit der Annahme $R_{\text{ges}} = R_r + R_l = 10$ willk. Einh. (also etwa 7% des unter "Normalbedingungen" vorhandenen Signals) und $(R_r - R_l)/(R_r + R_l) = 0,48$. Dies ist ein Beweis für die Gültigkeit von (1.5), also dafür, daß der in Abb.13 gezeigte Kurvenverlauf wirklich durch Reflexe verursacht wird. Zum Test, ob die Reflexe klein genug sind, braucht man nicht den gesamten Kurvenverlauf zu messen, sondern nur das Signal bei -20°C bei zwei verschiedenen Feldstärken. Mit dieser Methode wurde im Verlauf der Messungen mehrfach überprüft, ob $R_{\text{ges}}/I_{\text{ges}} < 1\%$ war, gegebenenfalls wurde nachjustiert.

1.2.2 Festlegung der Seitenarmtemperatur

Die Rubidiumdampfdichte in der Zelle muß so groß sein, daß das Signal groß gegen die Reflexe ist, darf aber nicht so groß werden, daß Strahlungsdiffusion auftritt (Absorption der Fluoreszenzlichtquanten durch den Dampf). Strahlungsdiffusion verringert die Polarisierung des Dampfes sehr stark, wie man in Abb.14 deutlich erkennt.

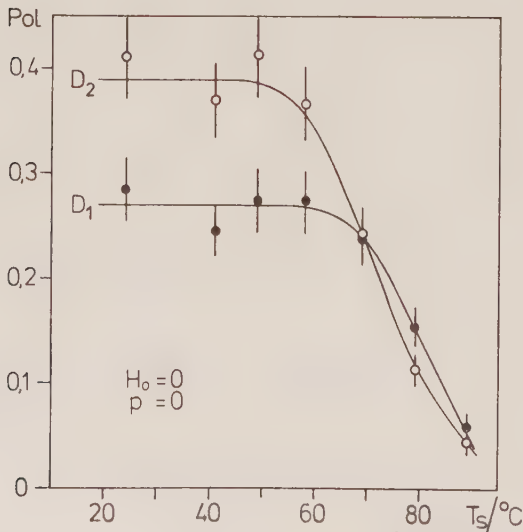


Abb.14: Abhängigkeit des D_1 - und D_2 -Polarisationsgrades von der Seitenarmtemperatur, gemessen im Thermostaten. Einfluß der Strahlungsdiffusion.

Zur Festlegung der günstigsten Meßtemperatur wurde in Abb.15 genauer gemessen und ein kleinerer Temperaturbereich durchgeföhren.

($\text{Pol}_{D_2}(30^\circ)$) ist eigentlich nicht der Polarisationsgrad der D_2 -Linie, sondern $(I_T - 2I_1)_{D_2} / (I_T + I_1)_{D_1}$. In Abb.14 ist der wirkliche Polarisationsgrad abgetragen)

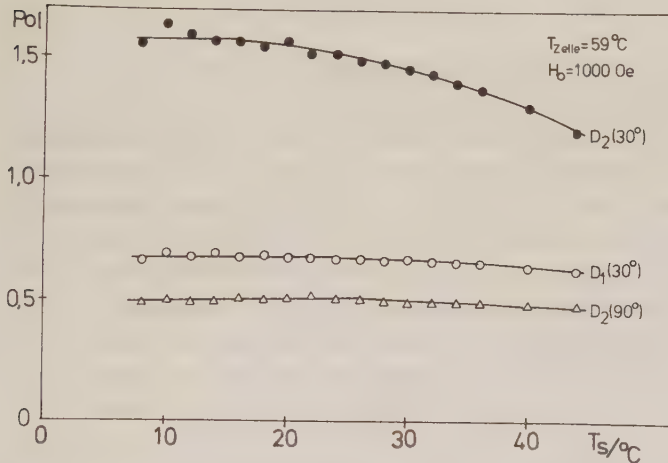


Abb.15: Abhängigkeit des $D_1(\alpha=30^\circ)$; $D_2(\alpha=30^\circ)$ -und $D_2(\alpha=90^\circ)$ -Polarisationsgrades (gemessen mit dem Aufbau aus Teil III) von der Seitenarmtemperatur, gemessen im Thermostaten, zur Festlegung der maximal zulässigen Betriebstemperatur. (15 - 20°C).

Die günstigste Intensität wird bei einem Dampfdruck erreicht, der etwa 15 - 20°C entspricht. Bei den meisten Messungen änderte sich die Gesamtintensität beim Einlassen von Edelgas und mußte durch Verstellen der Seitenarmtemperatur nachgeregelt werden. Besonders stark trat dies bei den Messungen der Temperaturabhängigkeit, Teil III, auf. Diese Intensitätsschwankungen machten eine Normierung auf die Gesamtintensität $(I_T + I_1)_{D_1}$ notwendig.

1.2.3 Statistischer Fehler

Zunächst wurde der statistische Fehler des einzelnen Meßpunktes durch 10 - maliges Messen des gleichen Signals ermittelt. Dabei wurde das vom

ADC digitalisierte Signal über 30s (normale Meßdauer) gezählt. Für die große Komponente I_T betrug der Fehler 1%, für I_1 4% und für den Nullpunkt 5%. Diese Daten wurden im Programm (Fortran) zur Auswertung der Messungen zur Wichtung der Geradenpunkte (Gl.(I 3.23)) verwendet.

1.2.4 Symmetriekontrolle des Zirkularanalysators

Es ist wichtig, daß der Zirkularanalysator nicht durch ein Asymmetrie einen Polarisationsgrad vortäuscht. Dann würde für $p \rightarrow \infty$ der Polarisationsgrad nicht gegen Null, sondern gegen diesen endlichen, evtl. auch negativen Wert gehen. Deshalb wurde D_1 - und D_2 - Licht unpolarisiert eingestrahlt und kontrolliert, ob der gemessene Polarisationsgrad gleich Null war. Dies war sehr gut erfüllt. Zur Kontrolle wurde dieser Test mehrfach während der Messungen (nach jedem kleineren Umbau z.B.) wiederholt.

Man muß den Test für $H_0 = 0$ durchführen. Schaltet man nämlich das Magnetfeld an, so mißt man trotz unpolarisierter Einstrahlung einen endlichen Polarisationsgrad ($Pol_{D_1} = 0,16$ bei 870 Oe), der in Größe und Vorzeichen vom Magnetfeld abhängt. Dies ist aber kein Symmetriefehler der Apparatur, sondern es liegt tatsächlich eine Polarisation des Dampfes vor, die kleiner wird bei Edelgaszugabe und für größere Drucke gegen Null geht. Bei Zugabe von 27 Torr Helium war der Polarisationsgrad nicht mehr meßbar. Offenbar werden im Magnetfeld die Terme mit positiven m_j im Mittel anders angeregt als die mit negativen m_j . Die Zelle (enthält ^{85}Rb) steht im Magnetfeld, das Absorptionsprofil ändert sich also mit dem Feld. Die Lampe steht nicht im Feld (enthält natürliches Rb), das Linienprofil der Lampe ändert sich also nicht. Dadurch ändern sich die Anregungsbedingungen bei Änderung des Magnetfeldes.

1.2.5 Sensibilisiertes Fluoreszenzlicht?

Für die Auswertung der Messungen wird vorausgesetzt, daß wegen der großen Feinstrukturaufspaltung des Rubidium die Übergänge vom $^2P_{1/2}$ -Zustand zum $^2P_{3/2}$ -Zustand (und umgekehrt) zu vernachlässigen sind. Um das zu kontrollieren, wurde D_1 - Licht eingestrahlt und D_2 - Licht beobachtet. Das resultierende Signal war unmeßbar klein, und zwar bei 0 Torr ebenso wie bei 20 Torr Edelgas (Neon). Daraus kann man folgern,

daß im Druckbereich bis 3 Torr (Meßbereich) sensibilisierende Stöße beim Rubidium keine Rolle spielen.

1.2.6 Einfluß durch optisches Pumpen

Wie in Kapitel I 3.5 dargelegt wurde, darf bei den Messungen der Grundzustand $^2S_{1/2}$ nicht optisch gepumpt werden, da sich dadurch die Anregungsbedingungen mit dem Edelgasdruck verändern würden. Dadurch würden die Wirkungsquerschnitte verfälscht. Die durch optisches Pumpen im Grundzustand erzeugte Polarisierung $\langle J_z \rangle$ ist u.a. um so größer, je intensiver das eingestrahlte Licht ist (unterhalb der Sättigung). Würden also die Wirkungsquerschnitte verfälscht, so müßten sie bei einer wesentlich geringeren Intensität des Pumplichts als der normalerweise benutzten einen anderen Wert haben. Um das zu testen, wurde die Intensität mittels eines Graufilters im Anregungsstrahlengang um einen Faktor 15 herabgesetzt und dann $\sigma_{3/2}^{(1)} \text{ Rb-He}$ gemessen. Der so erhaltene Wert für $\sigma_{3/2}^{(1)}$ unterschied sich im Rahmen der Meßgenauigkeit (5%) nicht von den bei "Normalintensität" gemessenen. Daraus darf gefolgert werden, daß der Grundzustand bei den vorliegenden Versuchsbedingungen nicht optisch gepumpt wird. Ein evtl. daraus resultierender systematischer Fehler ist auszuschließen.

1.2.7 Einfluß durch den Einlauf von Stickstoff während der Messung

Der im folgenden beschriebene Test wurde mit der im Teil III der Arbeit benutzten Resonanzzelle durchgeführt, bei der das Rb im Seitenarm ca. 7cm von der Zellenmitte entfernt war. Der Seitenarm war unten angeglast.

Während der Messung ist natürlich der Hahn zur Quecksilberdiffusionspumpe geschlossen. Da die Apparatur nicht völlig dicht ist (Einlauf war < 1 Jäckel), läuft während einer mehrere Stunden dauernden Messung auch immer etwas Luft in die Zelle ein. Um zu testen, ob dies den Polarisationsgrad des Fluoreszenzlichtes verkleinert und damit die zu messenden Wirkungsquerschnitte vergrößert (bei Messungen mit steigendem Edelgasdruck), wurde der Polarisationsgrad ohne Edelgas bei geschlossenem Pumpenhahn (beginnend bei $p = 2 \cdot 10^{-6}$ Torr) über 1 1/2 Stunden gemessen ($p = 2 \cdot 10^{-4}$ Torr). Es wurde folgendes beobachtet: Die Gesamtintensität

nahm um einen Faktor 2,5 ab. Dies kann durch Quenching verursacht werden. Es kann aber auch daran liegen, daß bei abgestellter Hochvakuumpumpe die Atome wegen des fehlenden Unterdrucks keine Driftgeschwindigkeit in Richtung Pumpe (d.h. Zelle) mehr haben und dadurch schlechter aus dem langen Seitenarm herausdiffundieren können. Ähnliche Effekte wurden mit der verwendeten Zelle ja häufig beobachtet (siehe Teil III). Dann wäre diese Intensitätsänderung eine echte Dichteschwankung. Wesentlich ist aber, daß sich alle Polarisationsgrade D_1 , D_2 , D_2 -alignment nicht veränderten:

$\text{Pol}_{D_1} = 0,673$	vorher $0,681 \pm 0,01$	$\frac{I_r - I_l}{I_r + I_l}(D_1)$
$\text{Pol}_{D_2} = 1,568$	vorher $1,558 \pm 0,01$	$\frac{(I_r - I_l)(D_2)}{(I_r + I_l)(D_1)}$
$\text{Pol}_{D_2, 90^\circ} = 0,500$	vorher $0,500 \pm 0,005$	$\frac{I_\sigma - I_\pi}{I_\sigma + 1/2 I_\pi}$

Der Einlauf von Stickstoff in die Apparatur führt demnach nicht zu einer meßbaren zusätzlichen Depolarisation.

Es wurde von anderen Arbeitsgruppen manchmal der Vorwurf erhoben, daß unsere Meßergebnisse möglicherweise zu große Wirkungsquerschnitte liefern könnten, weil die Edelgase durch längeres Stehen nach dem Öffnen der Flaschen verunreinigt würden. Diese Bedenken können wir aber auf Grund mehrerer Meßergebnisse zurückweisen. So wurden eine Zeitlang die Edelgase gereinigt (durch Heizen in einer Cäsiumatmosphäre über mehrere Stunden). Die Meßergebnisse unterschieden sich nicht systematisch von denen, die mit ungereinigten Gasen gewonnen worden waren. Auch lieferten Messungen, die direkt nach dem Öffnen der Edelgasflaschen - also mit sauberem Gas - durchgeführt wurden, stets die gleichen Wirkungsquerschnitte wie solche, bei denen die Flaschen bereits 1 - 3 Monate vorher geöffnet worden waren. Daraus darf man wohl folgern, daß eine Verunreinigung der Gase durch den geringen Einlauf von Stickstoff die Wirkungsquerschnitte nicht verfälscht, eine Reinigung vor der Messung also unnötig ist.

2. Meßkurven und Meßgeraden

Zur Messung der Wirkungsquerschnitte wurde der Druck im Bereich 0...3 Torr in Schritten von ca. 0,2 Torr variiert und zu jedem Druck die Werte $I_R(D_1)$, $I_L(D_1)$, $I_R(D_2)$ und $I_L(D_2)$ gemessen. Dabei wurde immer kontrolliert, ob das Signal während der Messung dieser vier Werte konstant geblieben war. Der Druck wurde mit einem McLeod Manometer gemessen. Da die Fluoreszenzlichtintensität während einer Druckvariation nicht ganz konstant blieb, wurde auf die Gesamtintensität des D_1 -Fluoreszenzlichtes normiert (siehe Kap.I 3.1). Die so normierten Komponenten I_R^N , I_L^N sind in Abb.16 in Abhängigkeit vom Edelgasdruck aufgetragen für die verschie-
denen Gase. Zum Vergleich ist I_Q^N und I_π^N aus /7/ für Helium und Neon mit angegeben. Die Werte in Abb.16 sind alle durch den Wert $I_R(p=0)$ dividiert, so daß die Kurven bei Eins beginnen.

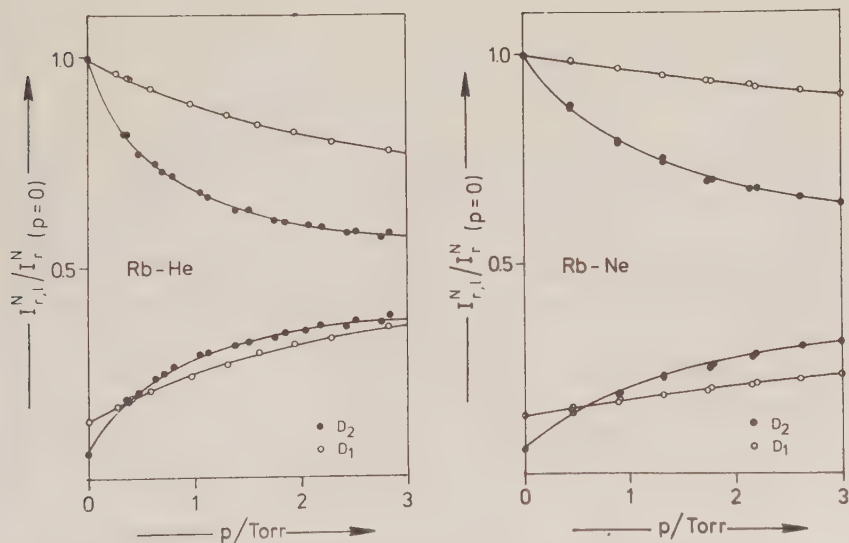


Abb.16a: Abhängigkeit der verschiedenen Fluoreszenzlichtkomponenten vom Edelgasdruck p für Helium und Neon. Die Werte sind auf die D_1 -Fluoreszenzlichtintensität $I_r + I_l$ normiert und durch $I_r(p=0)$ dividiert.

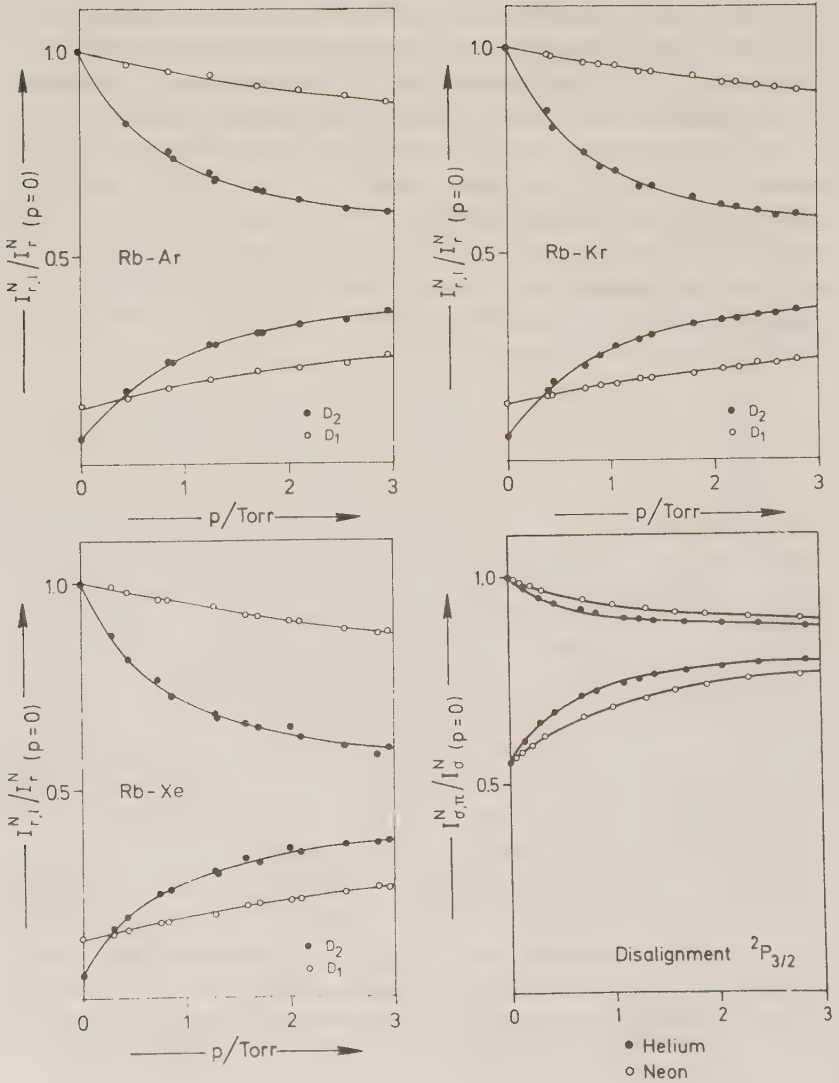


Abb.16b: Abhängigkeit der verschiedenen Fluoreszenzlichtkomponenten vom Edelgasdruck p für Argon, Krypton und Xenon. Zum Vergleich ist I_{σ} und I_{π} aus [7] für Helium und Neon gezeigt.

Bereits aus der Abtragung in Abb.16 erkennt man, daß die Zugabe eines Edelgases zum Rubidiumdampf zu einer Depolarisation desselben führt. Die Depolarisation ist im $^2P_{1/2}$ - Zustand offensichtlich wesentlich schwächer als im $^2P_{3/2}$ - Zustand. Um die Wirkungsquerschnitte zu bestimmen, wurden die normierten Verhältnisse

$$\frac{I_T + I_1}{I_T - I_1} (D_1) =: V_{1/2}^{(1),N}$$

$$\frac{(I_T + I_1)(D_1)}{(I_T - I_1)(D_2)} =: V_{3/2}^{(1),N}$$

und zum Vergleich die Werte aus /7/:

$$\frac{I_\sigma + 1/2 I_\pi}{I_\sigma - I_\pi} (D_2) =: V_{3/2}^{(2),N}$$

gegen den Fremddruck abgetragen.

Abb.17 zeigt, daß sich für alle Edelgase gute Geraden ergeben, wie es in Kap. I 3.3 theoretisch vorhergesagt wurde. Die Steigung der Geraden ist proportional zur Stoßrate/Teilchenzahldichte $\langle v_T \cdot \sigma \rangle$.

Die in Abb.17 gezeigten Ausgleichsgeraden wurden nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate mit einem Fortran-Programm an der Rechenanlage CAE 90-40 des Physikalischen Instituts Marburg berechnet. Dieses Programm wurde nach der in /61/ vorgeschlagenen Methode geschrieben, die Fehler sowohl in der x- als auch in der y-Richtung berücksichtigt und ausgehend von der Bedingung

$$y_i = a + b \cdot x_i$$

$$S = \sum_i (x_i - \bar{x})^2 / u_i + (a + b x_i - y_i)^2 / v_i$$

$$\frac{\partial S}{\partial x_i} = 0$$

(x_i, y_i) Meßpunkt, (x_i, y_i) Geradenpunkt

$u_i = \text{Varianz}(X_i), v_i = \text{Varianz}(Y_i)$

zu einem sehr rasch konvergierenden Iterationsverfahren (meist etwa 5 Schritte) zur Bestimmung von Steigung b und Achsenabschnitt a und ihrer Fehler führt. Die so erhaltenen Ergebnisse für $\sigma_j^{(k)}$ werden im nächsten Abschnitt wiedergegeben und diskutiert. Für die Bestimmung eines jeden Wirkungsquerschnitts wurden zwischen 3 und 5 solcher Geraden gemessen.

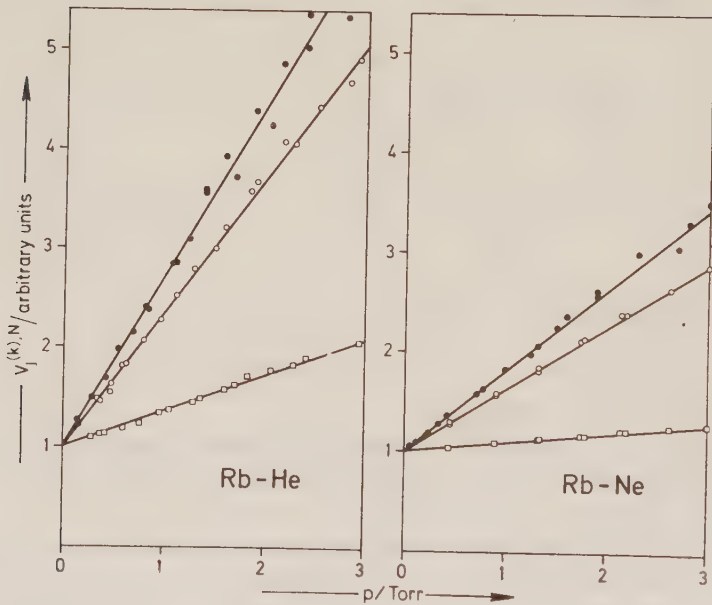


Abb.17a: Die Größen $1/(I_{\sigma} - I_{\pi})_{D_2}$ bzw. $1/(I_r - I_l)_{D_1, D_2}$ normiert auf die Gesamtintensitäten $(I_{\sigma} + 1/2 I_{\pi})_{D_2}$ bzw. $(I_r + I_l)_{D_1}$ als Funktion des Edelgasdruckes p . Die Achsenabschnitte der Geraden sind auf eins normiert worden. Helium und Neon.

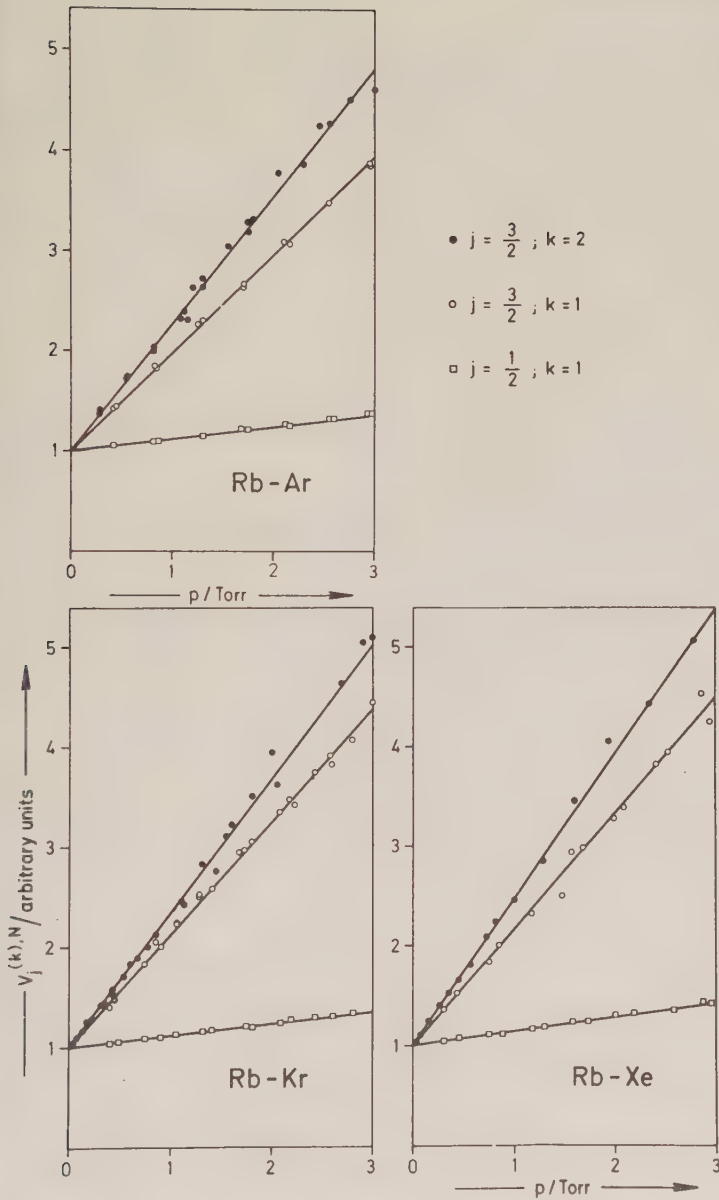


Abb.17b: Wie Abb.17a, Argon, Krypton und Xenon.

3. Ergebnisse und Diskussion

Die erhaltenen Werte für die Wirkungsquerschnitte sind in der ersten Spalte von Tabelle 1 angegeben. Der Vollständigkeit halber sind die Werte $\sigma_{3/2}^{(2)}$ aus /7/ mit angegeben (veröffentlicht in /39/). Der Fehler von 5% entspricht der 1 - 3 fachen Standardabweichung.

Im linken Teil der Tabelle sind zum Vergleich Meßergebnisse anderer Gruppen mitangegeben. Die Werte von Gallagher /14/ wurden aus der Verbreiterung von Hanle Kurven gewonnen. Korrigiert man sie mit dem von Bulos und Happer berechneten Faktor 2,67(/54/) zur Berücksichtigung des Einflusses der Hyperfeinstruktur, so erhält man die in Spalte 3 stehenden Werte. Diese sind noch um fast 20% kleiner als unsere Meßwerte. Ein Vergleich beider Messungen ergäbe einen Korrekturfaktor $\sigma_{1/2}^{(1)}(I=0)/\sigma_{1/2}^{(1)}(I=3/2) = 3,68 (\pm 7\%)$ für Helium, 3,125 für Neon, 3,29 für Argon und 3,39 für Krypton.

In der vierten und fünften Spalte stehen die in /16/ und /31/ mit der Methode des D_2 - Pumps gemessenen Relaxationswirkungsquerschnitte, die noch mit den in /57/ berechneten Verhältnissen $\chi^1 : \chi^2 : \chi^3 = 0,92:1,14:1,01$ korrigiert werden müssen, um $\sigma_{3/2}^{(1)}$ und $\sigma_{3/2}^{(2)}$ zu ergeben. Diese Werte für $\sigma_{3/2}^{(1)}$ und $\sigma_{3/2}^{(2)}$ sind damit natürlich nicht mehr unabhängig von einem Stoßmodell und können somit nicht zum Test verschiedener Theorien benutzt werden. Alle diese experimentellen Werte sind kleiner als die von uns gemessenen. Die Werte von Zhitnikov et.al. /16/ sind um 20% kleiner (also außerhalb des Meßfehlers), die von Papp und Franz/31/ um etwa 10%. Die Werte aus /31/ sind systematisch um 10% - 15% größer als die aus /16/. Diese Diskrepanzen (auch im Falle von Natrium, siehe dazu z.B. Elbel et.al. /29/) konnten bis heute nicht befriedigend erklärt werden. Auch die neue Arbeit von Lewis und Wheeler /58/ über den Einfluß des Kernspins auf die Relaxationsprozesse bringt keinen Aufschluss darüber.

Auffallend ist in der Tabelle 1 weiterhin der große Abfall unserer Ergebnisse für $\sigma_{1/2}^{(1)}$ vom Helium zum Neon hin, der von keiner der theoretischen Arbeiten, wohl aber von den Messungen aus /14/ bestätigt wird. Vergleicht man den theoretischen Wert aus der vorletzten Spalte (berechnet mit der in Kap. I 2.3 beschriebenen Theorie und den Pascale Vandeplanque Potentialen) mit den Meßwerten, so sieht man, daß nur für Helium eine sehr große Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment besteht. Die in der vorliegenden

Tabelle 1. Wirkungsquerschnitte für Desorientierung und Disalignment der Zustände $^2P_{3/2}$ und $^2P_{1/2}$ von Rubidium

		Experiment				Theorie									
		Diese Arbeit und /7/ (39/)		/14/ mit/54/	/16/ mit/57/	/31/ mit/57/	/45/ (28,42)	/36/ 24,3	/54/ 24,8	/62/ 35,4	/63/ 19,7	diese Arbeit 325 K (17/)	/64/ *)	/71/ 325 K	
$\sigma_{1/2}^{(1)}$ $\frac{R^2}{R^2}$	He	33,1	9,0	24,0			23,18 (28,42)	24,3	24,8	35,4	19,7	2,1	2,35(16,5)	14,5	
	Ne	18,75	6,0	16,0									17,9		
	Ar	31,9	9,7	25,9				28,6				35,6	29,0		
	Kr	35,95	10,6	28,3				32,1				35,9	35,9		
	Xe	47,9						35,9				52,6	56,15	77,2	
$\sigma_{3/2}^{(1)}$ $\frac{R^2}{R^2}$	He	126			109.0,92	119.0,92	111		57.0,92						
	Ne	121	57		99	109			98		141				
	Ar	243	136		206	244			193						
	Kr	343			297				250						
	Xe	391			324				315						
$\sigma_{3/2}^{(2)}$ $\frac{R^2}{R^2}$	He	157			109.1,14	119.1,14	136		57.1,14						
	Ne	156			99	109			98		209				
	Ar	314			206	244			193						
	Kr	410			297				250						
	Xe	492			324				315						

± 5%

*) $T = W/(3/2 k)$:

He: 300 K

Ne, Ar: 213 K

Kr: 333 K

Xe: 200 K

Arbeit und in /64/ berechneten Werte $\sigma_{1/2}^{(1)}$ sind für Helium eine Größenordnung zu klein, wohingegen für alle anderen Gase eine sehr gute Übereinstimmung (besser 10%) erreicht wird. Möglicherweise sind die für Helium berechneten Potentiale aus /50/ nicht langreichweitig genug. Dies erscheint aber etwas zweifelhaft in Anbetracht der Tatsache, daß die Potentiale in /50/ für alle fünf Edelgase mit denselben theoretischen Grundvoraussetzungen berechnet wurden. Außerdem müßte das Heliumpotential V_1 etwa so langreichweitig und anziehend werden wie das Argonpotential, um einen Meßwert von 33 Å^2 zu bestätigen. Eine andere Möglichkeit wäre noch, daß die benutzte Annahme eines streng adiabatischen Stoßes für Helium wegen der hohen Relativgeschwindigkeit nicht in dem Maße erfüllt ist wie für die anderen Edelgase, daß also beim Stoß doch eine Vermischung der 2P - Zustände auftritt. Dies würde die Relaxation im $^2P_{1/2}$ - Zustand vergrößern. Darauf scheinen auch die von Gallagher /15/ gemessenen Wirkungsquerschnitte σ_{sens} für den Übergang $^2P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$ hinzuweisen. Sie sind für Helium zwei Zehnerpotenzen größer als für Argon ($1 \cdot 10^{-1} \text{ Å}^2$ He, $1 \cdot 10^{-3} \text{ Å}^2$ Argon bei 450K) so daß beim Rb - He Stoß die Energielücke ΔE wesentlich leichter überwunden wird als bei den schweren Edelgasen. Allerdings ergibt die üblicherweise angenommene Adiabasiebedingung /36/ $\Delta E a_0 / h v_r \gg 1$ (a_0 : charakteristischer Abstand über den die Wechselwirkung wirksam ist) mit den Werten $\Delta E = 250 \cdot 1,2 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$ $v_r (400K) \approx 1500 \text{ m/s}$, $a_0 = 10 \text{ a.u.} \approx 5 \text{ Å}$ für Helium immer noch den Wert $16 \gg 1$. Dies scheint hinreichend gut erfüllt zu sein, allerdings ist diese Bedingung ja auch nur eine Modellannahme. Die an diesen Problemen arbeitenden Theoretiker sind an der Klärung der Diskrepanz zwischen Experiment und Theorie im Fall des Helium zur Zeit sehr interessiert, und es wäre gut, wenn eine Theorie entwickelt würde, die keine vollständige Trennung (aber auch keine vollständige Vermischung) der 2P -Niveaus voraussetzt.

Die in /39/ gegebene Erklärung für den Abfall des Wirkungsquerschnitts $\sigma_{1/2}^{(1)}$ vom Helium zum Neon erscheint bei Benutzung der Pascale Vandeplanque Potentiale wenig stichhaltig. Der untere ($^2P_{1/2}$) Zustand korrespondiert nur dann mit dem molekularen Σ - Zustand, wenn $V_\Sigma - V_\Pi < 0$ gilt. Dies ist aber auch für die schwersten Edelgase nur für Kernabstände zwischen etwa 14 a.u. und 30 a.u. der Fall. In diesem Bereich ist aber der in Gleichnung [I 2.32] definierte Faktor F wegen der schwachen Wechselwirkung sehr klein ($\leq 10^{-2}$), so daß dieser Bereich wenig zur Depolarisation beiträgt. Für kleinere Kernabstände liegt aber der $^2\Pi_{1/2}$ - Zustand auch für die schweren Edelgase unter dem $^2\Sigma_{1/2}$ - Zustand, so daß der in Kap. I 2.3 beschriebene Depolarisationsmechanismus wirksam wird.

Tabelle 2. Verhältnisse $\sigma_{3/2}^{(2)} / \sigma_{3/2}^{(1)}$. Meßwerte verglichen mit theoretischen Vorhersagen

	Diese Arbeit $\pm 7\%$	/45/	/57/	/65/	/66/	Elbel (nach/11/)	/36/	/63/
He	1,25	1,225	1,24	1,15	1,3	1,73	1,72	
Ne	1,29							1,48
Ar	1,29							
Kr	1,20							
Xe	1,26							

In Tabelle 2 sind die Verhältnisse $\sigma_{3/2}^{(2)} / \sigma_{3/2}^{(1)}$ angegeben, verglichen mit verschiedenen theoretischen Werten. Man kann sagen, daß das experimentell ermittelte Verhältnis für Helium sehr gut mit den Werten in /45/ und /57/ übereinstimmt. Der Wert 1,15 aus /65/ scheint etwas zu klein zu sein, wohingegen der aus dem Zweihaltepunktmodell (/11/) gewonnene Wert 1,73 zu groß ist ebenso wie das Verhältnis 1,72, das man leicht aus den in /36/ angegebenen relativen Wirkungsquerschnitten $\sigma(j\ m_j \rightarrow j' m'_j)$ berechnen kann, die einen Grenzwert für $v_r \rightarrow 0$ darstellen.

Wie schon in Kap. I 1. gesagt wurde, können Fluoreszenzlichtmessungen nicht zur Bestimmung von $\sigma_{3/2}^{(3)}$ verwendet werden, da der Photonenspin 1 zu niedrig ist, um Polarisationen vom Grad > 2 zu erzeugen und nachzuweisen. Benutzt man jedoch die in /45/ und /57/ vorausgesagten Verhältnisse

$$\sigma_{3/2}^{(2)} / \sigma_{3/2}^{(3)} = 1,124$$

Roueff, Suzor /45/

$$\sigma_{3/2}^{(3)} / \sigma_{3/2}^{(1)} = 1,09$$

und

$$\sigma_{3/2}^{(2)} / \sigma_{3/2}^{(3)} = 1,129$$

Okunevich, Perel /57/

$$\sigma_{3/2}^{(3)} / \sigma_{3/2}^{(1)} = 1,098$$

so bekommt man aus den Meßwerten $\sigma_{3/2}^{(2)}$ und $\sigma_{3/2}^{(1)}$ für Helium:

$$\sigma_{3/2}^{(3)} = 139 \text{ Å}^2$$

Mit den damit bekannten drei Wirkungsquerschnitten kann man die "Grawert-Parameter" b_1 , b_2 und b_3 (Grawert /53/) berechnen.

Danach gilt:

$$\sigma_{3/2}^{(1)} = \frac{4}{15} b_1 + \frac{4}{5} b_2 + \frac{56}{35} b_3 = 126 \text{ Å}^2$$

$$\sigma_{3/2}^{(2)} = \frac{4}{5} b_1 + \frac{8}{5} b_2 + \frac{4}{5} b_3 = 157 \text{ Å}^2$$

$$\sigma_{3/2}^{(3)} = \frac{8}{5} b_1 + \frac{4}{5} b_2 + \frac{36}{35} b_3 = 139 \text{ Å}^2$$

woraus sich ergibt:

$$b_1 = 28,05 \text{ Å}^2, b_2 = 62,75 \text{ Å}^2, b_3 = 42,70 \text{ Å}^2$$

und:

$\sigma(3/2 \ 3/2 \rightarrow 3/2 \ -3/2) = 24,4 \text{ Å}^2$	Relative Übergangswahrsch./57/ 0,18
$\sigma(3/2 \ 3/2 \rightarrow 3/2 \ -1/2) = 37,3 \text{ Å}^2$	0,27
$\sigma(3/2 \ 3/2 \rightarrow 3/2 \ 1/2) = 41,2 \text{ Å}^2$	0,30
$\sigma(3/2 \ 1/2 \rightarrow 3/2 \ -1/2) = 29,6 \text{ Å}^2$	0,22

in guter Übereinstimmung mit den relativen Stoßübergangswahrscheinlichkeiten von Okunevich und Perel /57/.

Die Übergänge $m_j = +3/2$ nach $m_j = -3/2$ und $m_j = +1/2$ nach $m_j = -1/2$ sind offenbar am wenigsten wahrscheinlich. Sie sind aber keineswegs unmöglich, wie man nach einem so einfachen Modell wie dem Einhaltepunkt - modell vermuten würde. Vergleicht man damit die in /36/ errechneten Wirkungsquerschnitte $\sigma(3/2 \ m_j \rightarrow 3/2 \ m_j')$, so sieht man, daß dort $\sigma(3/2 \ 3/2 \rightarrow 3/2 \ -3/2)$ und $\sigma(3/2 \ 1/2 \rightarrow 3/2 \ -1/2)$ zu klein herauskommen. ($\sigma(3/2 \ 3/2 \rightarrow 3/2 \ -3/2) = 0,086 \cdot \sigma_0$ verglichen mit $\sigma(3/2 \ 3/2 \rightarrow 3/2 \ -1/2) = 0,43 \cdot \sigma_0$). Da diese - wie auch die Ein - und Zweihaltepunktmodelle - einen Grenzwert für $v_{\text{rel}} \rightarrow 0$ darstellen, kann man sagen, daß trotz der adiabatischen Aufspaltung des $2^2P_{3/2}$ - Zustands in die molekularen Zustände $2^2\Pi_{3/2}$ und $2^2\Sigma_{1/2}$ auch die nichtadiabatische Wechselwirkung für die Depolarisation dieses Zustands eine Rolle spielt.

4. Zusammenfassung des II. Teils

In diesem Teil der Arbeit ging es darum, die Wirkungsquerschnitte $\sigma_{1/2}^{(1)}$ und $\sigma_{3/2}^{(1)}$ bei etwa 44°C möglichst genau zu messen. Zusammen mit den in /7/ gemessenen Werten $\sigma_{3/2}^{(2)}$ sind damit alle optisch direkt meßbaren Multipolrelaxationsquerschnitte im untersten P-Dublett von Rubidium im Stoß mit Edelgasen im Grundzustand bekannt. Bei den Messungen wurde ein ausreichend hohes Magnetfeld benutzt, so daß Kernspin und Hüllendrehimpuls entkoppelt waren. Dann erlaubt die Abnahme der Signale $(I_r - I_l)(30^\circ) \propto \langle J_z \rangle$ und $(I_\sigma - I_\pi)(90^\circ) \propto \langle J_z^2 - 1/3 J^2 \rangle$ eine Untersuchung der Relaxation von reiner Dipol- und Quadrupolpolarisation, die dann genau mit je einer Zeitkonstante unabhängig voneinander relaxieren. Die aus den Messungen gewonnenen Wirkungsquerschnitte werden so unabhängig von theoretischen Annahmen über die Stoßwechselwirkung, da in die Auswertung keine modell- abhängigen Gesichtspunkte eingehen. Dadurch ist es möglich, bestehende theoretische Berechnungen an Hand der Messungen zu prüfen. So sind z.B. unsere Meßwerte größer als die von Roueff und Suzor /45/ berechneten (ca. 13%), hingegen stimmen die Verhältnisse $\sigma_{3/2}^{(2)} / \sigma_{3/2}^{(1)}$ sehr gut überein, was darauf hindeutet, daß das Stoßmodell (halbklassische Rechnung unter Berücksichtigung der nichtadiabatischen Wechselwirkung) recht gut ist, aber evtl. die benutzten Potentiale (reines Austauschpotential) einer Korrektur bedürfen. Die Stoßmodelle aus /36/ und /11/ ($v_r \rightarrow 0$) liefern eindeutig zu große Verhältnisse. Unsere Berechnungen und die von Roueff für $\sigma_{1/2}^{(1)}$ bestätigen mit Ausnahme von Helium die in Kap. I 2.3 beschriebene Theorie und die Pascale Vandeplanque Potentiale.

Teil III. Messung der Temperaturabhängigkeit der Depolarisations- wirkungsquerschnitte im Bereich 310 K bis 720 K und Berechnung von $\sigma_{1/2}^{(1)}$ im Bereich 10 K bis 1000 K

1. Sinn der Messungen, theoretischer Hintergrund

Im Teil II der Arbeit wurde die Größe der Wirkungsquerschnitte und das Verhältnis $\sigma_{3/2}^{(2)} / \sigma_{3/2}^{(1)}$ zum Vergleich mit der Theorie benutzt. Daneben kann auch deren Energieabhängigkeit zum Test theoretischer Vorhersagen herangezogen werden. Dadurch wird man Aussagen über die Gültigkeit berechneter Potentiale erhalten, was mit den Messungen bei nur einer Temperatur nicht so gut möglich ist. So stieg in den letzten 2 Jahren das Interesse der theoretischen Physiker an der Bestimmung der Energieabhängigkeit der Depolarisationsquerschnitte. Z.B. berechneten Wilson und Shimon /63/ die Größen $\sigma_{1/2}^{(1)}$, $\sigma_{3/2}^{(1)}$ und $\sigma_{3/2}^{(2)}$ bei zwei verschiedenen Temperaturen (302 K und 526 K) mit Hilfe einer Partialwellenanalyse. Roueff /69/ berechnete die Wirkungsquerschnitte bei hohen Temperaturen (1720 K Rb-He, 4500 K Na-He), bei denen auch für die schweren Alkali die 2P -Zustände nicht mehr isoliert sind. Gayet und Brouillaud /71/ berechneten die Energieabhängigkeit von $\sigma_{1/2}^{(1)}$ im Bereich thermischer Energien $\approx 200 - 1000$ K mit Hilfe der Partialwellenanalyse und den Baylis Potentialen /49/. Wir berechneten - gleichzeitig mit Roueff - die Energieabhängigkeit von $\sigma_{1/2}^{(1)}$ für Rb-He, Rb-Xe und Rb-Kr-Stöße mit der in Kap.I 2.3 beschriebenen Theorie und den Potentialen aus /50/. *)

Bei den Messungen der Temperaturabhängigkeit interessierte uns insbesondere ein Vergleich des $^2P_{1/2}$ - mit dem $^2P_{3/2}$ - Zustand. Aufgrund des in beiden Zuständen unterschiedlichen Depolarisationsmechanismus (Kap.I 2) hat man verschiedenes Verhalten bei Temperaturänderung zu erwarten.

*) veröffentlicht in /17/

1.1 Energieabhängigkeit der Depolarisationsquerschnitte im $^2P_{3/2}$ -Zustand, einfaches Modell

Für den $^2P_{3/2}$ -Zustand benutzen wir folgende einfache Modellvorstellung: Die energetische Aufspaltung des $^2P_{3/2}$ -Zustands in molekulare $\overline{\Pi}$ - und $\overline{\Sigma}$ -Zustände (Kap. I 2.1) führt zu einer Dephasierung dieser Zustände während der Stoßdauer τ_c . Die Phase $\Delta\varphi$ ist proportional zur Aufspaltung und zu τ_c :

$$\Delta\varphi = (V_{\Sigma} - V_{\Pi}) \cdot \tau_c / \hbar \quad (1.1)$$

Abb. 18 zeigt den schematischen Verlauf von $\Delta\varphi(b)$ und der Übergangswahrscheinlichkeit $P(b) \propto \sin^2(\Delta\varphi(b)/2)$. (Siehe auch /6, Seite 22/).

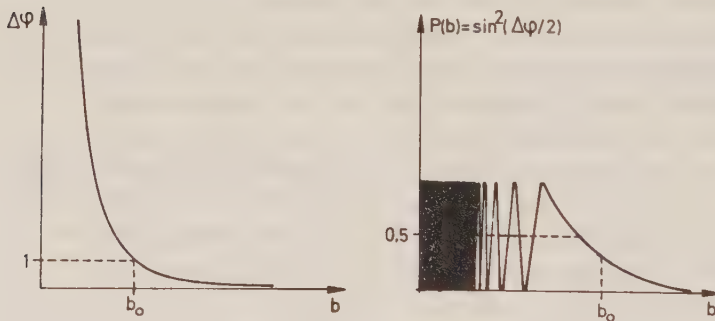


Abb. 18: Schematischer Verlauf von $\Delta\varphi(b)$ und $P(b) \propto \sin^2(\Delta\varphi(b)/2)$

Die Übergangswahrscheinlichkeit $P \propto \sin^2(\Delta\varphi(b)/2)$ oszilliert für $\Delta\varphi > 1$ (willkürliche Schranke) und klingt für $\Delta\varphi < 1$ schnell ab. Für $\Delta\varphi > 1$ kann P zu 0,5 gemittelt werden. Dann bekommt man aus der Bedingung $\Delta\varphi = 1$ einen kritischen Stoßparameter b_0 , mit dem näherungsweise gilt:

$$\begin{aligned} P(b) &= 0,5 & \text{für } b < b_0 \\ P(b) &= 0 & \text{für } b > b_0 \end{aligned} \quad (1.2)$$

$$\text{Also} \quad \sigma \propto b_0^2 \quad (1.3)$$

b_0 bekommt man aus (1.1) und $\tau_c = b/v_T$

$$(V_\Sigma - V_\Pi) \cdot \frac{b_0}{v_T \cdot \hbar} = 1 \quad (1.4)$$

Mit einer einfachen Annahme für das Potential $V_\Pi \approx 0$ und $V_\Sigma \propto 1/R^n$ und $v_T^2 \propto T$ ergibt das:

$$\sigma(T) \propto T^{-\frac{1}{n-1}} \quad (1.5)$$

Die doppelt logarithmische Abtragung σ gegen T ergibt danach eine fallende Gerade mit der Steigung $-1/(n-1)$. Eine aufwendigere Rechnung von Faroux /75/ führt zum gleichen Ergebnis. Damit wird es also möglich, die Potenz n des abstoßenden Σ - Potentials zu bestimmen.

1.2 Energieabhängigkeit des Wirkungsquerschnitts $\sigma^{(1)}_{1/2}$

1.2.1 Rubidium - Helium, einfaches Modell

Aus Gleichung(I 2.32) geht hervor, daß eine Depolarisation des $^2P_{1/2}$ - Zustands nur dann stattfindet, wenn die Stoßpartner so nahe zusammenkommen, daß die molekulare Wechselwirkung dominiert ($\Delta V \geq \Delta \epsilon$), d.h. daß der Drehimpuls an die Kernverbindungsachse koppelt und so durch die Drehung derselben während des Stoßes seine anfängliche Ausrichtung verliert (Kap. I 2.3). Der Kernabstand muß also kleiner sein als ein typischer Radius R_1 (siehe auch /36/), für den gilt: $\Delta V(R_1) \approx \Delta \epsilon$. Kernabstände $R > R_1$ führen nicht zur Depolarisation, Kernabstände $R \leq R_1$ führen zu Depolarisation. In diesem einfachen Bild kann man also sagen, daß $P(b) = 0$ gilt für alle Stoßparameter b die zu kleinsten Abständen $R_0 > R_1$ führen, und daß $P(b) = 1$ gilt für alle Stoßparameter b , die zu kleinsten Abständen $R_0 \leq R_1$ führen. Damit wird:

$$\sigma = \pi \cdot b^2(R_1) \quad (1.6)$$

Unter Annahme einer klassischen Bahn bekommt man:

$$\sigma(W) = \pi \cdot R_1^2 \cdot \left(1 - \frac{V(R_1)}{W}\right) \quad \text{für } W \geq V(R_1) \quad (1.7)$$

$$\sigma = 0 \quad \text{für } W \leq V(R_1)$$

Für abstoßende (positive) V - wie bei Helium - ergibt (1.7) einen Anstieg von σ über W .

Mit den Pascale Vandeplanque Potentialen ist:

$$\Delta E = 237,6 \text{ cm}^{-1} \quad (1 \text{ cm}^{-1} \cong 1,2 \cdot 10^{-4} \text{ eV})$$

und für $R_1 = 7,75 \text{ a.u.}$ ($= 7,75 \cdot 0,529 \text{ \AA}$) ist

$$V(R_1) = 266,3 \text{ cm}^{-1}$$

Mit diesem R_1 ist die in Abb.19 gezeigte Kurve $\sigma(W)$ berechnet worden.

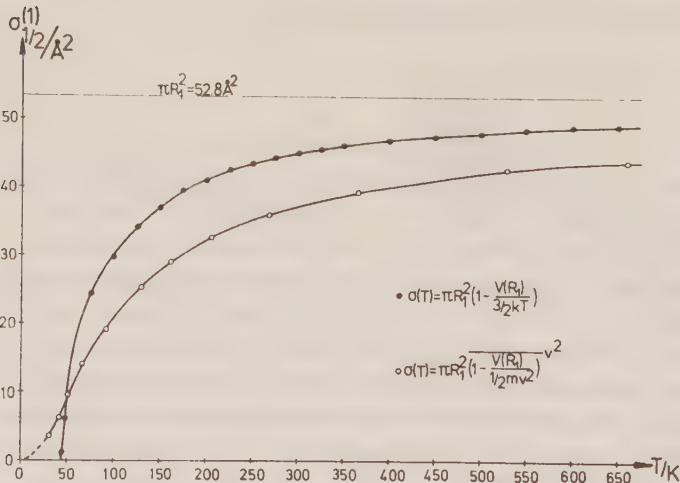


Abb.19: $\sigma^{(1)}/A^2$ als Funktion der Temperatur, berechnet mit einem einfachen Stoßmodell. ●●● unter Annahme von $W = 3/2 kT$

○ ○ ○ durch Mittelung mit einer Maxwellverteilung

$R_1 = 7,75 \text{ a.u.}$

$V(R_1)$: Pascale Vandeplanque

In der oberen Kurve von Abb.19 wurde angenommen, daß $W = 3/2 kT$ gilt, während die untere Kurve durch Mittelung mit einer Maxwellverteilung gewonnen wurde (Elbel, private Mitteilung). Die Mittelung führt zu der Formel

$$\left(1 - \frac{V(R_1)}{W}\right) = \left(1 - \frac{2V(R_1)}{kT}\right) \cdot \left(1 - \Phi\left(\sqrt{\frac{2V(R_1)}{kT}}\right)\right) + \sqrt{\frac{2V(R_1)}{kT}} \cdot \Phi'\left(\sqrt{\frac{2V(R_1)}{kT}}\right) \quad (1.8)$$

Die Funktion $\Phi(a) = \int_0^a e^{-x^2} dx$ ist tabelliert.

Der Vergleich der Wirkungsquerschnitte nach Gleichung (1.7) bei 300 K mit dem Experiment ergibt eine Eingrenzung von R_1 :

$$R_1 = 7,0 \text{ a.u.} \Rightarrow \sigma(300 \text{ K}) = 30,8 \text{ Å}^2$$

$$R_1 = 7,5 \text{ a.u.} \Rightarrow \sigma(300 \text{ K}) = 37 \text{ Å}^2.$$

Also gilt $7,0 \text{ a.u.} < R_1 < 7,5 \text{ a.u.}$

Im Widerspruch zu der Annahme $R_1 = 13 \text{ a.u.}$ in /36/.

Mit diesem einfachen Modell erwartet man also ein unterschiedliches Verhalten des $^2P_{3/2}$ - und des $^2P_{1/2}$ - Zustands für Helium, derart daß die Wirkungsquerschnitte $\sigma_{3/2}^{(2)}$ und $\sigma_{3/2}^{(1)}$ mit steigender Temperatur kleiner werden, der Wirkungsquerschnitt $\sigma_{1/2}^{(1)}$ aber mit steigender Temperatur deutlich ansteigt.

1.2.2 $\sigma_{1/2}^{(1)}(W)$ mit der halbklassischen Theorie aus Kap. I 2.3

Besser als aus dem eben beschriebenen Modell, für das der Verlauf des Potentials keine Rolle spielte, kann man die Energieabhängigkeit von $\sigma_{1/2}^{(1)}$ aus Gleichung (I 2.31) und Gleichung (I 2.32) berechnen. Für V_1 und ΔV (Gl. (2.33)) benutzten wir dazu die Pascale Vandeplanque Potentiale /50/. $\sigma(W)$ und die zugehörigen $\alpha(b)$ wurden mit Hilfe eines Fortran Programms an der Rechenanlage CAE 90-40 des Physikalischen Instituts der Universität Marburg berechnet. Der klassische Umkehrpunkt R_0 wurde vorgegeben und b gemäß

$$b = R_0 \cdot \sqrt{1 - \frac{V(R_0)}{W}}$$

daraus berechnet. Die Integration über R wurde dann von R_0 bis $R \approx 70$ a.u. (Kernabstand, bei dem F hinreichend klein ist) mit der Gauss'schen Methode durchgeführt. Die Integration über b wurde mit der Trapezregel vorgenommen. Bei den schweren Edelgasen tritt wegen des anziehenden Potentials V_1 bei der Wahl von R_0 noch eine Schwierigkeit hinzu. Darüber wird im Kap. 1.2.2.2 mehr gesagt werden.

1.2.2.1 $\sigma_{1/2}^{(1)}(\omega)$ für Rubidium-Helium, abstoßendes Potential

Für Helium wurde für V_1 (Berechnung der Bahn) und für ΔV eine lineare Interpolation des Pascale Vandeplanque Potentials benutzt. Eine bessere, etwa quadratische, Interpolation hätte zuviel Rechenzeit in Anspruch genommen. Abb.20 zeigt die Potentiale V_1 , V_2 und V_3 in Abhängigkeit vom Kernabstand R .

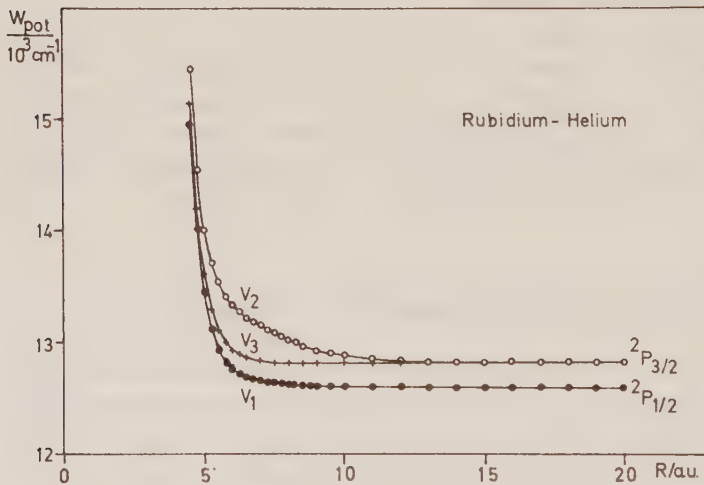


Abb.20: Pascale Vandeplanque Potentiale /50/ zwischen Rb im 5^2P - Zustand und Helium im Grundzustand

In Abb.21 ist der mit diesen Potentials berechnete Faktor F nach Gleichung (I 2.32) in Abhängigkeit von R gezeigt.

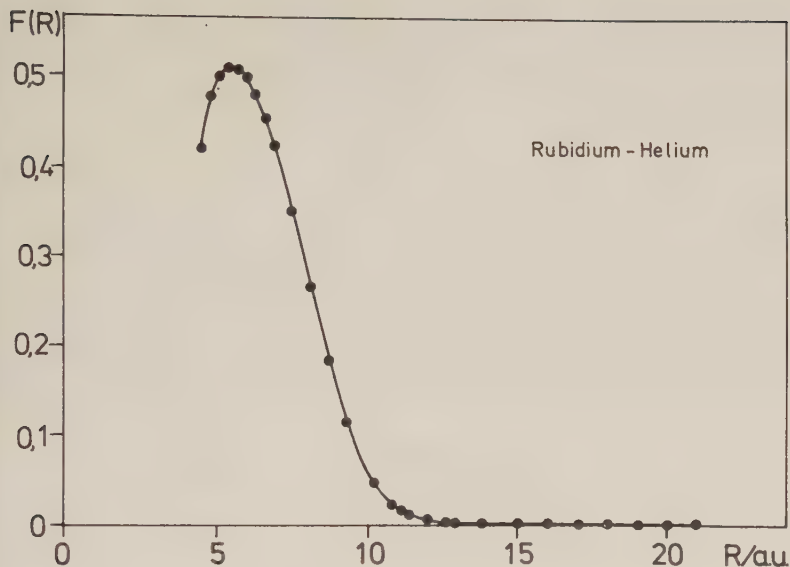


Abb. 21: $F(R)$ nach Gleichung (I 2.32) für Rb - Helium. Berechnet mit den Pascale Vandeplanque Potentialen

Die Übergangswahrscheinlichkeit $P(b) = \sin^2(\alpha(b))$ ist als Beispiel für zwei Energien in Abb.22 dargestellt. Die Unregelmäßigkeiten in den numerisch berechneten Punkten kommen durch die benutzte lineare Interpolation zustande.

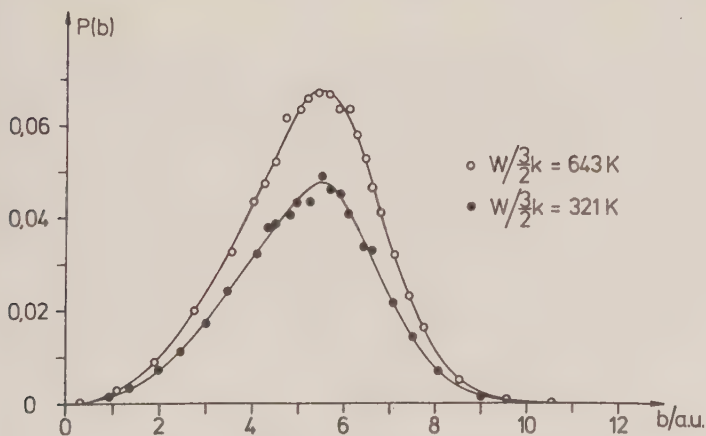


Abb.22: Übergangswahrscheinlichkeit $P(b) = \sin^2(\alpha(b))$ für Rb - He. Berechnet mit den Pascale Vandeplanque Potentialen.

Abb.23 zeigt schließlich $\sigma_{1/2}^{(1)}(T)$ (mit $W = 3/2 kT$). Man sieht, daß die halbklassische Theorie und die Pascale Vandeplanque Potentiale zu einem Anstieg des Wirkungsquerschnitts über der Energie führen, wie dies auch das im vorigen Kapitel beschriebene einfache Modell voraussagte.

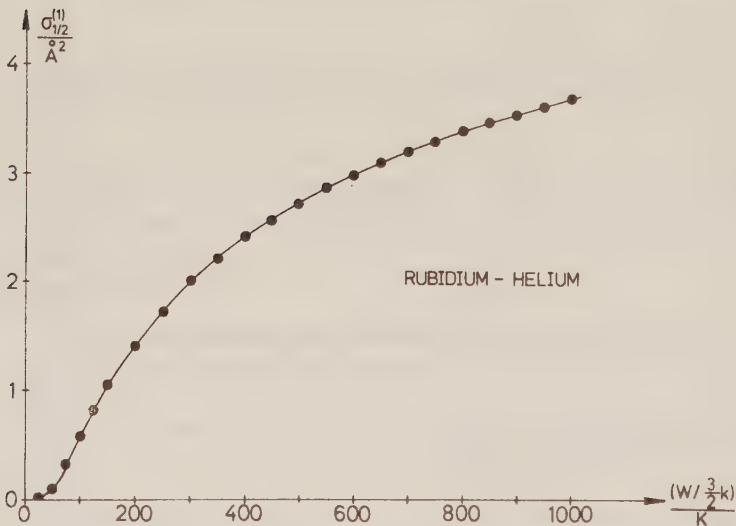


Abb.23: $\sigma_{1/2}^{(1)}(W)$ für Rb - He. Berechnet mit den Pascale Vandeplanque Potentialen.

Das P. V. Potential V_1 ist im Falle Rb-He abstoßend für alle Kernabstände kleiner 13 a.u.. Deshalb bleiben bei einer niedrigen Relativenergie der Stoßpartner die Kernabstände so groß, daß überall $F \leq 10^{-5}$ gilt, was natürlich zu sehr kleinen Wirkungsquerschnitten führt. Bei höheren Energien können die Stoßpartner immer dichter zusammenkommen, so daß jetzt beim Stoß auch Bereiche überstrichen werden, in denen die molekulare Wechselwirkung zu dominieren beginnt und der Drehimpuls an die Kernverbindungsachse koppelt. Dies führt zum Anstieg des Wirkungsquerschnitts über der Energie. Der Anstieg beträgt in unserem Meßbereich ca. 50% ($2\text{\AA} \rightarrow 3\text{\AA}$), müßte also bei einer Meßgenauigkeit von 10% gut zu messen sein.

Neben den P. V. Potentialen wurde auch noch das in /44,45/ benutzte Austauschpotential verwendet:

$$V_{\Sigma} = 0,0098 \cdot R^{2,558} \cdot e^{-0,877 \cdot R} \quad (1.9)$$

$$V_{\pi} = 0$$

Da für $R \rightarrow 0$ V_{Σ} nicht gegen unendlich sondern wieder gegen Null geht (und vorher ein flaches Maximum hat), ist dieses Potential für kleine Kernabstände unrealistisch. Es wurde deshalb ein "hard core" angenommen. $V_1 = \infty$ für $R < R_a$. Der Wert von $\sigma_{1/2}^{(1)}$ hängt deutlich von der Wahl des R_a ab und liegt nur dann in einer vernünftigen Größenordnung, wenn R_a unrealistisch klein gewählt wird (mit den P. V. Potentialen ergibt sich bei den verwendeten Energien ein R_a von etwa 5 - 6 a.u.). So bekommt man bei $T = 400$ K :

$$\sigma_{1/2}^{(1)} = 17,9 \text{ Å}^2 \quad \text{für } R_a = 3 \text{ a.u.}$$

$$\sigma_{1/2}^{(1)} = 21,3 \text{ Å}^2 \quad \text{für } R_a = 1,5 \text{ a.u.}$$

Die in /44,45/ angegebenen Werte, bei denen kein hard core des Potentials angenommen wurde, sondern (1.9) auch für kleine Kernabstände benutzt wurde, erscheinen nach diesen Ergebnissen zweifelhaft. Abb.24 zeigt als Beispiel $\alpha(b)$ für die beiden genannten Fälle.

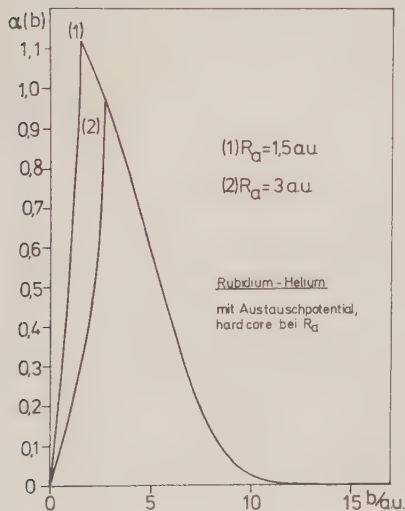


Abb.24: $\alpha(b)$ nach Gl. (I 2.32)
für Rb-He. V_{Σ} und V_{π} nach (1.9).
Hard core bei 3 a.u. und 1,5 a.u..

Abb. 25 zeigt die mit den Potentialen (1.9) und $R_a = 1,5$ a.u. numerisch berechnete Kurve $\sigma_{1/2}^{(1)}(\omega)$.

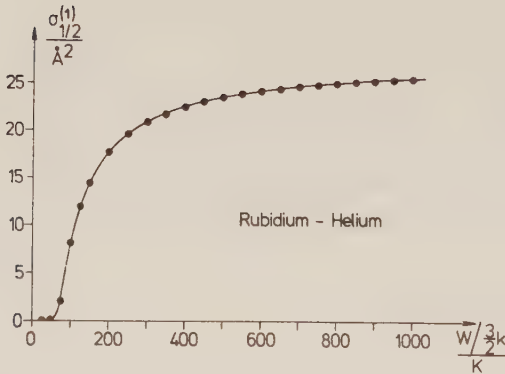


Abb.25: $\sigma_{1/2}^{(1)}(\omega)$ für Rb-He mit V_{Σ} und V_{π} nach Gl.(1.9), Ref./44/. Annahme eines hard cores bei $R_a = 1,5$ a.u.

Abb.26 zeigt $\sigma_{1/2}^{(1)}(\omega)$, wobei $\Delta V = V_{\Sigma} - V_{\pi}$ mit Gl. (1.9) berechnet wurde, für V_{π} aber das P. V. Potential benutzt wurde. Größe der Wirkungsquerschnitte und Energieabhängigkeit sind ähnlich wie in Abb.23.

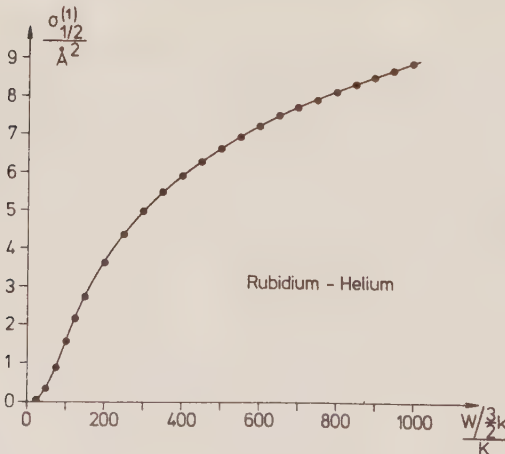


Abb.26: $\sigma_{1/2}^{(1)}(\omega)$ für Rb-He. ΔV mit Gl. (1.9). V_{π} nach Pascale Vandeplanque

Zusammenfassend kann man sagen: Die in Kapitel I 2.3 beschriebene Theorie führt bei Wahl eines abstoßenden Potentials zu einem Anstieg von $\sigma_{1/2}^{(1)}$ über der Energie im Gegensatz zu dem Verhalten von $\sigma_{3/2}^{(1)}$. Mit den verwendeten Potentialen (Pascale Vandeplanque /50/ und Austauschpotential nach /44/) ist der berechnete Wirkungsquerschnitt $\sigma_{1/2}^{(1)}$ erheblich kleiner als der gemessene ($33 \text{ \AA}^2$, siehe Teil II).

1.2.2.2 $\sigma_{1/2}^{(1)}(W)$ für Rubidium - Krypton und Rubidium - Xenon, teilweise anziehende Potentiale.

Für die schweren Edelgase wird das mit dem $^2P_{1/2}$ - Zustand bzw. $^2\Pi_{1/2}$ - Zustand korrespondierende Potential V_1 teilweise anziehend. Abb.27 zeigt die Pascale Vandeplanque Potentiale für Rb-Kr und Rb-Xe.

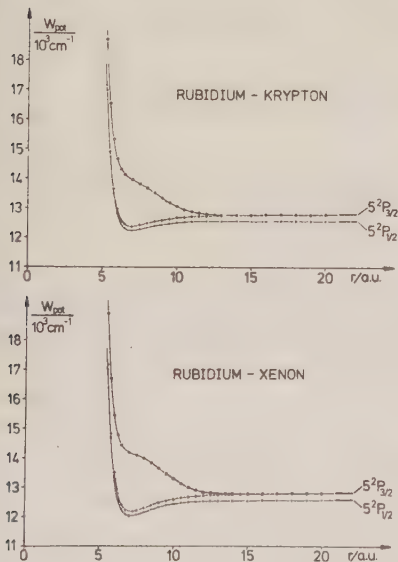


Abb.27: Pascale Vandeplanque 2P - Potentiale für Rubidium im 5^2P - Zustand und Krypton und Xenon im Grundzustand

Beim Stoß in einem solchen anziehenden Potential geschieht Folgendes:

An einem ganz bestimmten Punkt der Bahn, den wir R_{orb} nennen wollen, werden die anziehenden Kräfte genauso groß wie die Zentrifugalkräfte, d.h. es wird $\ddot{R} = 0$. Ist an diesem Punkt zufällig die Radialgeschwindigkeit $\dot{R} = 0$, so

bleibt das Teilchen endlos in einer Kreisbahn um den - als ruhend betrachteten - Stoßpartner. $\dot{R} = 0$ gilt am Umkehrpunkt der Bahn. $\ddot{R} = 0$ und $\dot{R} = 0$ sind somit gleichzeitig erfüllt, wenn man den Stoßparameter $b = b_{orb}$ gerade so groß wählt, daß R_{orb} der Umkehrpunkt der Bahn wird. Es muß also gelten:

$$b_{orb}^2 = R_{orb}^2 \cdot \left(1 - \frac{V_1(R_{orb})}{W}\right) \quad (1.10)$$

und

$$\left. \frac{\partial V_1}{\partial R} \right|_{R_{orb}} + \left. \frac{\partial}{\partial R} \right|_{R_{orb}} \left(W \cdot \frac{b_{orb}^2}{R^2} \right) = 0 \quad (1.11)$$

(Man kann also auch ein effektives Potential $V_{eff} = V_1 + W b^2/R^2$ einführen und fordern $\left. \frac{\partial V_{eff}}{\partial R} \right|_{R_{orb}} = 0$).

Gl. (1.10) und (1.11) führen durch Einsetzen auf die Bedingung:

$$R_{orb} \cdot \left. \frac{\partial V_1}{\partial R} \right|_{R_{orb}} - 2W + 2V_1(R_{orb}) = 0 \quad (1.12)$$

R_{orb} kann man also als Nullstelle dieser Gleichung bestimmen. (1.12) läßt sich nur für ein 12 - 6 Potential explizit lösen, für alle anderen Potentiale muß die Lösung numerisch erfolgen. Bei unseren Berechnungen wurde (1.12) in einem von W. Kamke ausgearbeiteten Unterprogramm gelöst, das die regula falsi benutzt.

Wir wollen nun betrachten, wie die Lösung von (1.12) sich verhält bei Änderung der Energie W . Für kleine Energien hat (1.12) zwei Lösungen, von denen nur die größere der Orbitingradius ist, die kleinere aber zumindest im verwendeten halbklassischen Bild keine physikalische Bedeutung hat, da sie als Umkehrpunkt der Bahn nicht in Frage kommt. Mit wachsendem W wird R_{orb} und damit b_{orb} kleiner (siehe Abb. 28^{*)} und die Nullstellen von Gl. (1.12) rücken näher zusammen. Bei einer Grenzenergie W_{grenz} gibt es nurmehr eine Lösung und für größere W werden die Lösungen imaginär. Dort gibt es also kein Orbiting mehr. Die anziehenden Kräfte sind nicht mehr in der Lage, den

^{*)} Die Abbildungen 28, 29 und 30 wurden aus /76/ entnommen. Die gezeigten Kurven wurden dort mit Hilfe eines Fortran-Programms berechnet.

Zentrifugalkräften das Gleichgewicht zu halten. Für ein Lennard Jones 12 - 6 Potential ist die Grenzenergie $\psi_{\text{grenz}} = 0,8 \cdot \epsilon$, ϵ = Topftiefe. Auch für die Pascale Vandeplanque Potentiale ist sie etwa $0,8 \cdot \epsilon$.

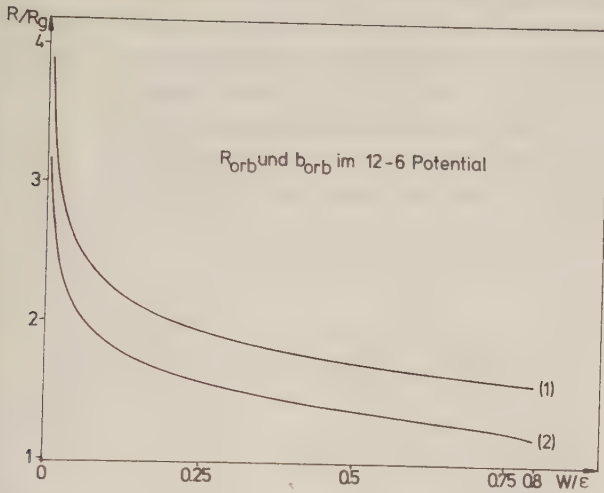


Abb.28: R_{orb} (2) und b_{orb} (1) als Funktion der kinetischen Relativenergie, berechnet mit einem Lennard-Jones 12-6 Potential. ϵ = Topftiefe, R_g = Gleichgewichtsradius

Der Anschaulichkeit halber sind in Abb.29 einige Bahnen gezeigt mit Stoßparametern in der Nähe von b_{orb} , berechnet mit einem Lennard - Jones 12 - 6 Potential. Ist b zu groß, fliegt das Teilchen mit einer mehr oder

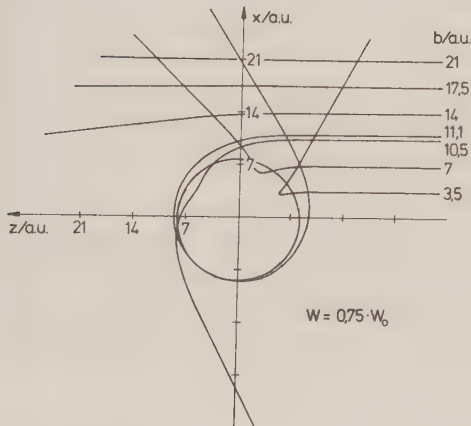


Abb.29: Teilchenbahnen beim Stoß im 12-6 Potential für verschiedene Stoßparameter. ϵ = Topftiefe des Potentials

weniger starken Krümmung am Stoßpartner vorbei, für zu kleine b stößt das Teilchen am hard core des Potentials an. Für $b \approx b_{\text{orb}}$ macht es bereits fast eine Kreisbahn. In Abb.30 ist der klassische Streuwinkel als Funktion des Stoßparameters b zu sehen. $\mathcal{N}(b)$ wurde für verschiedene Energien W berechnet. Man erkennt deutlich die Polstelle des Streuwinkels im Falle des Orbiting. Aber auch für $b \approx b_{\text{orb}}$ sind die Streuwinkel noch sehr groß. Wie in Gl.(1.12) vorausgesagt wird, wird b_{orb} immer kleiner, je größer die Energie wird. Schließlich verschwindet der Orbitingpol bei zu hohen Energien ganz und wird zum Regenbogenmaximum. Die Streuwinkel werden dann nicht mehr unendlich groß, sind aber mit W in der Nähe von W_{grenz} immer noch von der Größenordnung π .

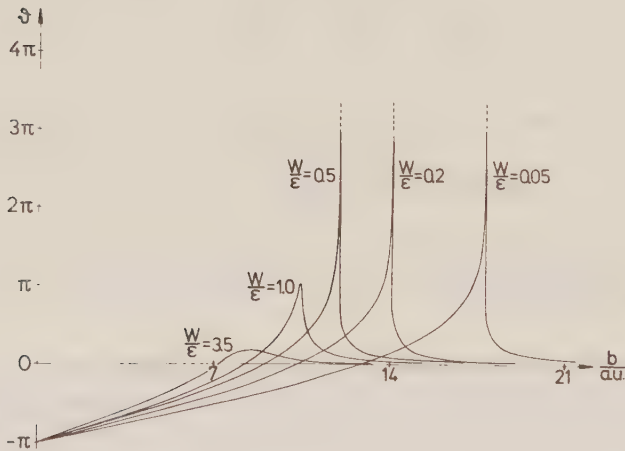


Abb.30: Klassischer totaler Streuwinkel $\mathcal{N}$ als Funktion des Stoßparameters für verschiedene kinetische Relativenergien W . Berechnet mit einem 12-6 Potential der Topftiefe ϵ . $\mathcal{N} = -\pi$ für $b = 0$.

Das Unterprogramm zur Bestimmung der Nullstellen von Gl.(1.12) braucht die zweite Ableitung dieser Funktion. Dies ist notwendig, weil die beiden Lösungen für kritische Energien in der Nähe von W_{grenz} sehr dicht zusammenliegen. Deshalb kann aber für die Bahn keine lineare Interpolation von V_1 benutzt werden. Eine andere - etwa quadratische - Interpolation würde zuviel Rechenzeit erfordern. Deshalb wurde versucht, die Pascale Vandeplanque Potentiale mit Lennard - Jones 12 - 6 bzw. 10 - 6 Potentialen anzunähern. Dabei wurden Topftiefe und Gleichgewichtsradius aus den

Pascale Vandeplanque Potentialen genommen. Abb.31 zeigt den Vergleich für Krypton und Xenon. Man sieht, daß die Abweichungen gering sind. Da außer - dem diese Potentiale nur zur Berechnung der Bahn, nicht aber zur Berechnung von ΔV benutzt wurden, sind von daher nur geringe Einflüsse auf die Größe der Wirkungsquerschnitte zu erwarten. ΔV wurde nachwievor aus einer linearen Interpolation der Pascale Vandeplanque Potentiale gewonnen.

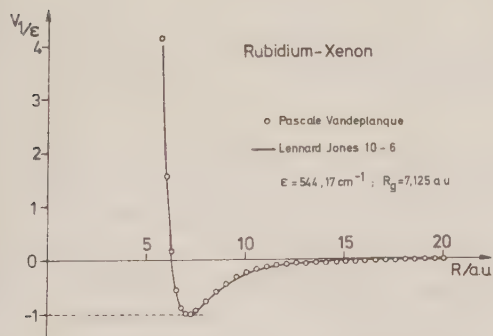
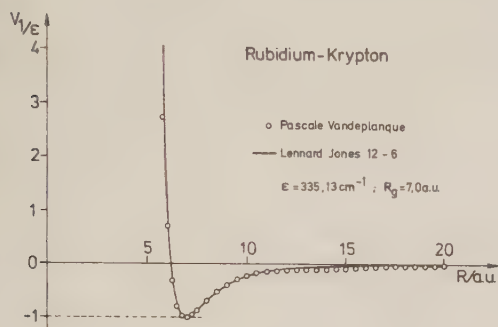


Abb.31: Lennard Jones Potentiale im Vergleich mit Pascale Vandeplanque Potentialen für Rubidium im $^2P_{1/2}$ - Zustand und Krypton und Xenon im Grundzustand.

Welchen Einfluß haben nun die genannten Bahneffekte (Orbiting) auf den Wirkungsquerschnitt $\sigma_{1/2}^{(1)}$? Da ja die Depolarisation im $^2P_{1/2}$ - Zustand zurückzuführen ist auf eine Mitführung des Drehimpulses mit der Molekülachse während des Stoßes, wird schon die geringste Tendenz des Drehimpulses, an diese Achse zu koppeln, zu einer vollständigen Umorientierung führen, wenn der

Drehwinkel $180^\circ - \alpha$ beliebig groß wird. Um genauere Aussagen zu erhalten, betrachten wir Gl. (I 2.32). Abb.32 zeigt die mit dieser Gleichung berechneten Übergangswahrscheinlichkeiten $P(b) = \sin^2(\alpha(b))$ für verschiedene Energien für den Fall Rubidium - Krypton. Für sehr kleine Energien ist

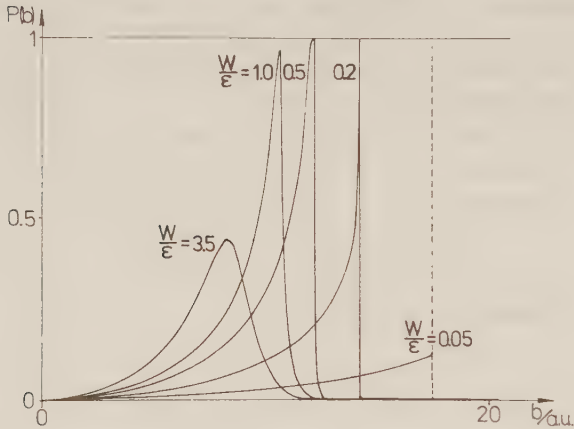


Abb.32: Übergangswahrscheinlichkeiten $P(b) = \sin^2(\alpha(b))$ nach Gl.(I 2.32) für Rb-Kr berechnet mit den Pascale Van der Waals Potentialen bei verschiedenen Relativenergien.

der Orbitingradius so groß, daß die schwachen Molekülkräfte (kleine Faktoren F) zu relativ kleinen Übergangswahrscheinlichkeiten führen. Nur für den unendlich großen Winkel ist $P(b)$ etwa 1. Genauer gesagt oszilliert $P(b)$ wegen des $\sin^2(\alpha(b))$ zwischen 0 und 1, wäre also 0,5 zu setzen. Aber dieser Peak ist so schmal, daß man ihn mit numerischen Methoden kaum erfassen kann und er auch nichts zum Wirkungsquerschnitt beiträgt. Für höhere Energien wird der Orbitingradius immer kleiner, so daß die Bereiche großer Winkel mehr und mehr mit denen starker Kopplung an die Molekülachse zusammenfallen. Für diese Energien wird das Orbiting sehr wichtig. Die Übergangswahrscheinlichkeiten werden sehr groß und führen zu maximalen Wirkungsquerschnitten. Bei noch größeren Energien wird b_{orb} weiter kleiner, so daß wegen der Integration $\int_0^\infty P(b) \cdot b \cdot db$ die Wirkungsquerschnitte schon vor Erreichen der Orbitinggrenzenergie wieder etwas abfallen. Ist die Energie schließlich zu groß, findet kein Orbiting mehr statt. Die Streu - winkel und die Übergangswahrscheinlichkeiten werden kleiner und ihr

Maximum liegt bei kleineren Stoßparametern. Die Wirkungsquerschnitte werden dadurch weiter abnehmen. Abb.33 zeigt die Ergebnisse $\sigma_{1/2}^{(1)}(w)$ für Krypton und Xenon. Man sieht den Anstieg für kleine Energien, das Maximum bei Energien, für die das Orbiting den Hauptanteil liefert, und den Abfall des Wirkungsquerschnitts zu größeren Energien hin, für die kein Orbiting mehr möglich ist.

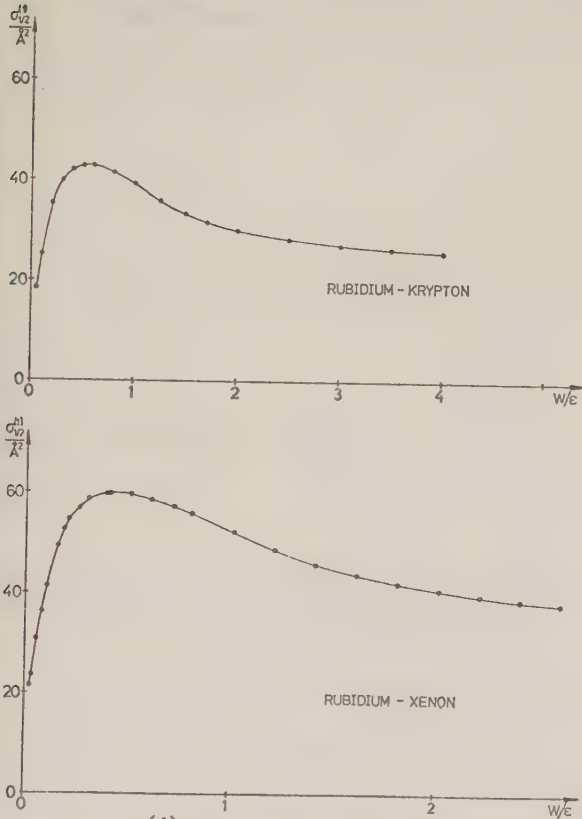


Abb.33: $\sigma_{1/2}^{(1)}$ in Abhängigkeit von der Relativenergie w für Rb-Kr und $^{1/2}\text{Rb-Xe}$. Berechnet mit Pascale Vandeplanque Potentialen und Gl.(I 2.31) und (I 2.32).

Man sieht also: Bahneffekte führen dazu, daß die schweren Edelgase im $^2P_{1/2}$ - Zustand eine ganz andere Energieabhängigkeit des Depolarisationsquerschnitts zeigen als die leichten und daß auch hier ein unterschiedliches Verhalten des $^2P_{1/2}$ - und des $^2P_{3/2}$ - Zustands zu sehen

sein muß.

Im Programm zur Berechnung von $\sigma_{1/2}^{(1)}$ wurde folgendermaßen vorgegangen: Wie auch im Heliumfall wurde der Umkehrpunkt der Bahn R_0 vorgegeben und b dazu exakt berechnet. Die Integration über R von R_0 bis ca. 70 a.u. wurde mit der Gaußschen Methode, die über b mit der Trapezregel durchgeführt. Da aber im teilweise anziehenden Potential der Stoßparameter nicht überall eine eindeutige Funktion des Kernabstandes ist (siehe Abb.34), kann man nicht jedes beliebige R_0 als Bahnumkehrpunkt vorgeben.

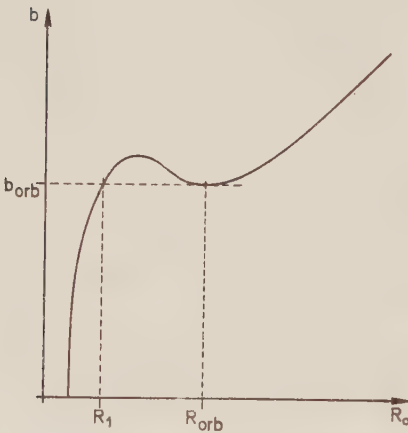


Abb.34: Schematischer Verlauf $b(R)$ im teilweise anziehenden Potential

Die Kernabstände R mit $R_1 < R < R_{orb}$ sind nicht Umkehrpunkt einer klassischen Bahn. Es wurde also zunächst R_{orb} mit Gleichung (1.12) bestimmt und dazu b_{orb} nach (1.10) berechnet. Dann wurde R_1 aus der Bedingung $b_{orb}^2 - R_1^2 \cdot (1 - V(R_1)/W) = 0$ bestimmt. Der Bereich zwischen R_1 und R_{orb} war somit bekannt und wurde bei der Wahl von R_0 ausgelassen.

In Kapitel 3 werden die Ergebnisse dieser Berechnungen mit den experimentellen Befunden verglichen.

Die halbklassische Rechnung enthält im Gegensatz zu der Partialwellenanalyse (z.B. /71/) die quasigeordneten Zustände im effektiven Potential nicht ("shape elastic resonances"), wie sie z.B. in /73/ berechnet werden. Die Berücksichtigung dieser im klassischen Fall verbotenen Zustände (es handelt sich ja gerade um Zustände mit " R_0 " im Bereich R_1 bis R_{orb} . Die Teilchen können dorthin nur durch Tunneleffekt durch die Potentialbarriere des effektiven Potentials gelangen.) würde die berechneten Wirkungsquerschnitte noch etwas vergrößern.

2. Der Versuchsaufbau

Der in Abb.35 gezeigte Versuchsaufbau entspricht im wesentlichen dem im II. Teil der Arbeit benutzten, ist jedoch auf die speziellen Anforderungen der Temperaturabhängigkeitsmessungen zugeschnitten. Da auch das alignment mit gemessen werden sollte, ist unter 90° ein zweiter Beobachtungsstrahlengang für die D_2 - Linie vorhanden, in dem I_σ und I_π mit Hilfe eines Linearpolarisators getrennt werden, wie dies ja in /7/ ausführlich beschrieben ist. Das nachgeschaltete $\lambda/4$ - Plättchen diente

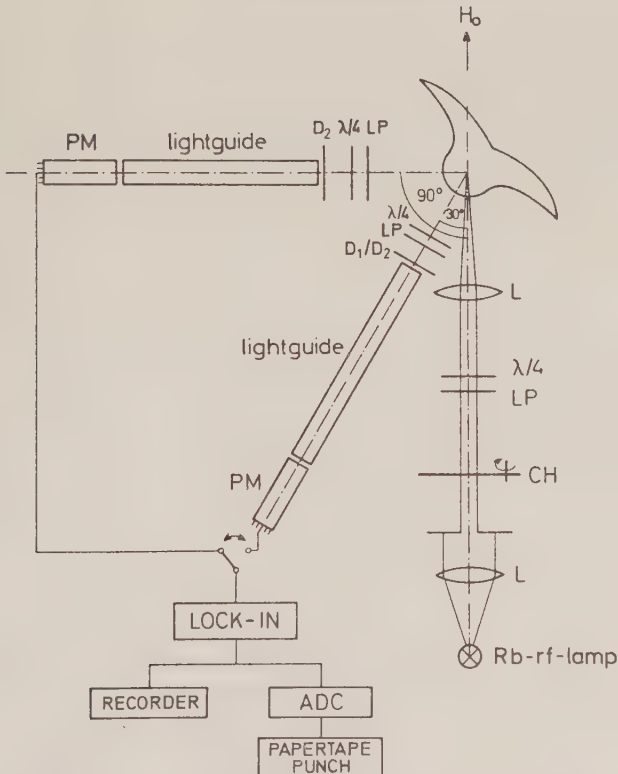


Abb.35: Versuchsaufbau zur Messung der Temperaturabhängigkeit der Wirkungs-

querschnitte $\sigma_{1/2}^{(1)}$, $\sigma_{3/2}^{(1)}$, $\sigma_{3/2}^{(2)}$

dazu, daß kein linear polarisiertes Licht auf den Photomultiplier (ebenfalls ein gekühlter 150 CVP) fällt, da dieser - auch schon wegen des Lichtleiters - etwas polarisationsempfindlich reagiert. Da die D_1 - Linie des Fluoreszenzlichtes ja keine Linearpolarisation haben kann, wurde die Symmetrie des Nachweises durch Einstrahlen von D_1 - Licht nachgeprüft. Mit der D_1 - Linie war kein Unterschied zwischen I_σ und I_π festzustellen (unabhängig von der Feldstärke H_0). Ein dadurch verursachter systematischer Fehler war also auszuschließen.

2.1 Die Resonanzzelle

Bei der im II. Teil der Arbeit benutzten Resonanzzelle war der Rubidium - spiegel so dicht an der Zelle, daß beim Heizen der Zelle - auch schon unter 100°C - die Fluoreszenzlichtintensität stark anstieg. Auch schien es ungünstig, daß der kältere Seitenarm über der heißen Zelle war, da dann beim Einlaß der Edelgase durch Wärmeleitung und Konvektion die Intensität weiter stark anstieg. Deshalb wurde zunächst eine Zelle gebaut, die aus einer Kugel von ca. 2cm Durchmesser mit zwei unter 90° versetzt angebrachten Wood'schen Hörnern zur Vermeidung von Reflexen von der Zellenrückwand bestand. Eine so kleine Zelle hat den Vorteil, daß dann immer die Beobachtung in der Nähe der Glaswand erfolgt und daß man fast senkrecht durch das Glas hindurch beobachtet. Ferner wird die Temperatur sehr homogen sein, wenn sich diese Zelle in einem vergleichsweise großen Ofen ($\varnothing = 13\text{cm}$) befindet. Die Schwierigkeit ist, die Reflexe klein genug zu halten. Jedoch gelang es durch sorgfältiges Justieren doch, den Reflexanteil unter 1% herabzudrücken. Der Seitenarm der Zelle begann direkt unterhalb des Resonanzvolumens, jedoch war das Rubidium (natürliche Isotopenzusammensetzung) in den unteren Teil des Seitenarms destilliert. Es befand sich also ca. 4cm vom Zellenmittelpunkt entfernt. Zunächst sollte die Temperatur des Edelgases mit einem fast in Zellenmitte hängenden Thermoelement (NiCr - Konstantan) gemessen werden. Dies hat sich jedoch nicht bewährt, da die relativ poröse Oberfläche des Thermodrahtes stets mit Rubidium beladen war, was beim Heizen zu einem Intensitätsanstieg führte. Bei höheren Temperaturen wurden offenbar so viele Verunreinigungen aus dem Draht freigesetzt, daß es zu starkem Quenching des Fluoreszenzlichtes kam. Der Thermodraht wurde deshalb wieder entfernt und die Temperatur außen

mit zwei Thermoelementen gemessen, die unten und oben an die Zelle angekittet waren. Der Mittelwert wurde zur Auswertung benutzt. Dieses Verfahren schien uns wegen des relativ großen Temperaturgradienten, der durch die Nähe des Seitenarms verursacht wurde, jedoch zu ungenau. Deshalb wurde eine neue Zelle gebaut. Der Resonanzkörper entspricht genau dem der eben beschriebenen Zelle. Der Seitenarm wurde so lang gewählt, daß davon ca. 5cm außerhalb des Ofens waren. Am unteren Ende des Seitenarms, also außerhalb des Ofens, befand sich das Rubidium (siehe Abb.36). Dieser untere Teil wurde mit Hilfe eines Kupferblocks gekühlt, auf den Kühlschlangen aufgelötet waren, durch die von einem Kryostat (Frigomix + Thermomix 1480 E BKU, Fa. B. Braun Melsungen A.G. Temperaturgenauigkeit $\pm 0,01^{\circ}\text{C}$) die Kühlflüssigkeit (destilliertes Wasser oder Alkohol) gepumpt wurde. Dadurch wurde erreicht, daß die Zellenheizung und die Seitenarmkühlung einander nicht beeinflussten, und daß die Zellentemperatur über dem ganzen Resonanzvolumen sehr homogen war (kein Unterschied oder $1 - 7^{\circ}\text{C}$ Unterschied, je nach Ofentemperatur, zwischen der unten und der oben an der Zelle gemessenen Temperatur).

2.2 Der Ofen

Der Ofen ist zusammen mit der Resonanzzelle in Abb.36 dargestellt.

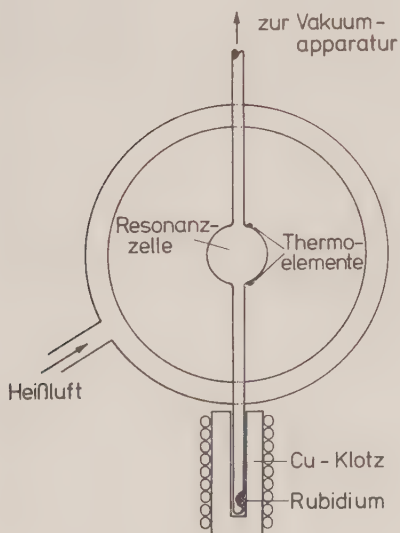


Abb.36: Ofen mit Resonanzzelle
Querschnitt

Der Ofen bestand aus zwei zylindrischen Messingrohren mit den Maßen $\phi_a \approx 15\text{cm}$, $\phi_i \approx 13\text{cm}$, Länge $\approx 20\text{cm}$. Hinten war der Ofen durch ein als Lichtfalle ausgebautes Asbestrohr (Länge ca. 30cm) abgeschlossen, vorne durch einen Deckel, der das Fenster für das einfallende Licht und eine Öffnung für die Beobachtung enthielt. In den Zwischenraum zwischen den beiden Rohren wurde mit einem Föhn (Typ Leister Elektronik) Heißluft geblasen. Die Temperatur des Föhns ließ sich stufenlos von Zimmertemperatur bis 600°C regeln. Schwierigkeiten bereitete die Schwärzung des Ofens. Ruß brannte nach kurzer Zeit ab. Auch Ofenrohrlack erwies sich als ungeeignet, da er glänzt und außerdem durch das starke Arbeiten der Rohre schnell abblättert. Abhilfe schaffte erst das Beizen der Oberfläche. Beizen mit normaler Messingbeize und ebenso mit Kupfernitrat erwies sich als nicht zufriedenstellend. Erst das Beizen mit "Neofix" nach vorherigem Sandstrahlen der Oberfläche gab eine hinreichend matte und tiefschwarze - wenn auch nicht ganz gleichmäßige - Färbung, die auch hitzebeständig war und sich sehr bewährt hat. Nach außen hin war der Ofen mit einer Schicht von 1 - 2cm Asbestwatte isoliert.

2.3 Einfluß der Wärmestrahlung

Bei ersten Heizversuchen wurde festgestellt, daß das Signal bei Temperaturen über 200°C stark verrauscht wurde. Dies konnte auf Wärmestrahlung aus dem Ofen zurückgeführt werden. Aus der Planck'schen Strahlungsformel für schwarze Strahler

$$\Phi_{e,\lambda} = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \cdot \frac{d\lambda}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda T}\right) - 1} \quad (2.1)$$

erhält man das Maximum der Energieverteilung für $T = 600\text{ K}$ bei einer Wellenlänge von $\lambda = 23913\text{nm}$. Im Wellenlängenbereich, in dem der Photo - multiplifier empfindlich ist, bekommt man mit

$$\int_{700\text{nm}}^{900\text{nm}} \Phi_{e,\lambda} \cdot d\lambda \approx 23,4 \cdot 10^{-6} \frac{\text{J}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \quad (2.2)$$

durch Integration über den beobachteten Raumwinkel:

$$\left. \frac{dE}{dt} \right|_{(700-900)nm} \approx 10^{-12} \text{ J/s} \quad (2.3)$$

Aus dem gemessenen Anodenstrom und der Anodenempfindlichkeit berechnet man demgegenüber nur eine Fluoreszenzlichtausbeute von $2 \cdot 10^{-13}$ J/s. Das heißt, ohne Lock-In Verfahren wäre eine Messung bei heißem Ofen überhaupt nicht möglich. Mit Lock-In Verfahren führt die Wärmestrahlung zu einem starken Rauschen. Abhilfe schaffte eine enge Begrenzung des gesehenen Wellenlängenbereichs. Die Rubidium - D - Filter sind verspiegelt und damit gegen Wärmestrahlung geblockt. Außerdem lassen sie nur einen Bereich von etwa 40 Å durch (Halbwertsbreite). Deshalb wurden die D - Filter in den Beobachtungsstrahlengang gestellt. Der Einfluß der Wärmestrahlung war dann eliminiert.

2.4 Testmessungen

Zunächst wurden, wie auch schon im zweiten Teil ausführlich beschrieben, die Reflexe gemessen, und der Strahlengang und die Zelle so justiert, daß der Reflexanteil $< 1\%$ der Gesamtintensität ausmachte.

Weiter wurde der Zirkularpolarisator im 30° -Strahlengang und der Linearpolarisator im 90° -Strahlengang auf Symmetrie überprüft. Dieser Test wurde auch mit heißem Ofen durchgeführt, um zu sehen, ob das thermische Arbeiten der Apparatur etwas ausmachte. Auch der Polarisationsgrad bei voll angeschaltetem Feld wurde daraufhin überprüft. In beiden Fällen waren die Ergebnisse unabhängig von der Ofenheizung. Außerdem wurde durch Kreuzen der D - Filter im Anregungsstrahlengang und im Beobachtungsstrahlengang getestet, ob die sensibilisierte Fluoreszenz bei den höheren Temperaturen etwas ausmacht, da σ_{sens} über der Temperatur ansteigt ($/15/$). Auch diese Frage konnte verneint werden.

Die Einstellung der Rubidium - Dampfdichte stellte sich als sehr zeitraubend heraus. Sind Zelle und Seitenarm mehrere Stunden auf Zimmertemperatur, so setzt sich immer etwas Rubidium auf den Zellwänden ab. Beim Aufheizen der Zelle kam es dadurch zunächst immer zu einem raschen Intensitätsanstieg. War die Zelle längere Zeit heiß, nahm das Signal durch den Destilliereffekt wieder sehr stark ab und sank meist unter den Wert, den

es bei Zimmertemperatur hatte. Die Seitenarmtemperatur wurde stets so gewählt, daß das Signal dem bei Zimmertemperatur etwa entsprach. Oft änderte es sich aber nach ein paar Stunden wieder. Gallagher /15/ hat bei seinen Messungen - bei denen auch der Rb - Spiegel weit vom Resonanzvolumen entfernt war - ähnliche Effekte gesehen. Man kann dann nicht mehr mit der Seitenarmtemperatur unmittelbar den Dampfdruck in der Zelle regeln, sondern der Rb - Spiegel dient mehr als eine Art Reservoir. Diese Effekte waren stets sehr stark abhängig von der Temperaturdifferenz zwischen Seitenarm und Resonanzvolumen und auch abhängig von der Vorgeschichte der Zelle (wie lange sie auf Zimmertemperatur war, oder wie heiß sie vorher war u.ä.). Außerdem veränderte sich beim Einlaß von Edelgas in die Zelle fast immer die Rb - Dichte auf Grund der veränderten Wärmeleitung und Diffusion in der Zelle. Auch dies hing stark ab von der Temperaturdifferenz zwischen Seitenarm und Zelle. Da bei etwa konstanter Dichte gemessen werden muß, wurden diese Schwankungen durch Nachregeln der Seitenarmtemperatur aufgefangen. Dadurch bedingt dauerte eine Druckvariation stets mehrere Stunden, in ungünstigen Fällen auch einen ganzen Tag.

Bei einigen Messungen wurde festgestellt, daß der Signalnullpunkt - wahrscheinlich durch Einstreuen des Hochfrequenzsenders der Spektrallampe - sich etwas, und zwar sprunghaft, veränderte. Dies führte zu einer Verfälschung des sehr kleinen Signals $I_1 D_2$ und auch $I_1 D_1$ und machte damit einige der Messungen unbrauchbar. Um dies zu vermeiden, wurde für die Messungen von I_1 ein viermal so großer Arbeitswiderstand (4 M Ω) verwendet wie für die Messungen von I_r und des Nullpunktes (250 k Ω). Der Umrechnungsfaktor zwischen beiden Meßgrößen wurde experimentell zu 3,7 bestimmt. Durch diese künstliche Erhöhung des Signals wurde man unabhängiger von der Lage des Nullpunktes. Dadurch streuten die Meßpunkte nun erheblich weniger, und die Messungen wurden zuverlässiger.

3. Meßergebnisse, Diskussion

3.1 Helium

Abb.37 zeigt $\sigma_{3/2}^{(1)}$ und $\sigma_{3/2}^{(2)}$ in Abhängigkeit von der Zelltemperatur für Helium in doppelt logarithmischer Auftragung. Man sieht, daß bei beiden Wirkungsquerschnitten die Meßpunkte auf einer fallenden Gerade liegen.

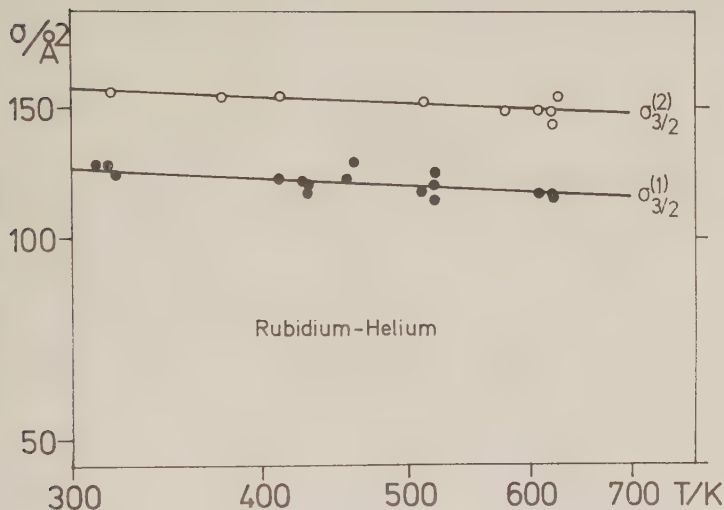


Abb.37: $\sigma_{3/2}^{(1)}$ und $\sigma_{3/2}^{(2)}$ in Abh. von der Temperatur für Rb-He.

Nach den theoretischen Vorhersagen ist die Steigung $= -1/(n-1)$. Aus den Messungen entnimmt man $n = 11 (\pm 4)$. Im $^2P_{3/2}$ - Zustand entspricht somit der experimentelle Befund den theoretischen Vorhersagen.

Abb.38 zeigt die Meßergebnisse $\sigma_{1/2}^{(1)}$ im Vergleich mit den theoretischen Werten (Kap. I 2.3 und III 1.2.2). Man sieht, daß Experiment und Theorie sich widersprechen. Zunächst sind die Meßwerte eine Größenordnung größer als die berechneten Werte. Außerdem zeigen die Meßwerte so gut wie keine Temperaturabhängigkeit oder vielleicht einen ganz schwachen Abfall aber nicht den vorhergesagten Anstieg über der Temperatur. Beides scheint darauf hinzuweisen, daß das Rb - He Potential V_1 auch für kleinere Radien noch anziehend sein muß. Dann müßte es aber anziehender sein, als das Neon Potential, für das ja zumindest die Größe der Wirkungsquerschnitte richtig wieder gegeben wird /64/ (Tabelle 1, II. Teil). Dies scheint wenig wahrscheinlich. Weiterhin ist es möglich, daß ΔV langreichweitiger sein muß. Da aber die erwähnte Diskrepanz nur beim Helium so extrem auftritt, kann es auch sein, daß die Trennung der P - Zustände für Helium nicht so vollständig ist wie für die schweren Edelgase. Dies wurde auch schon im II. Teil der Arbeit im Kap.3 erwähnt. Eine Beimischung des $^2P_{3/2}$ - Zustands würde nicht nur

den Wirkungsquerschnitt vergrößern, sondern auch die Temperaturabhängigkeit verändern.

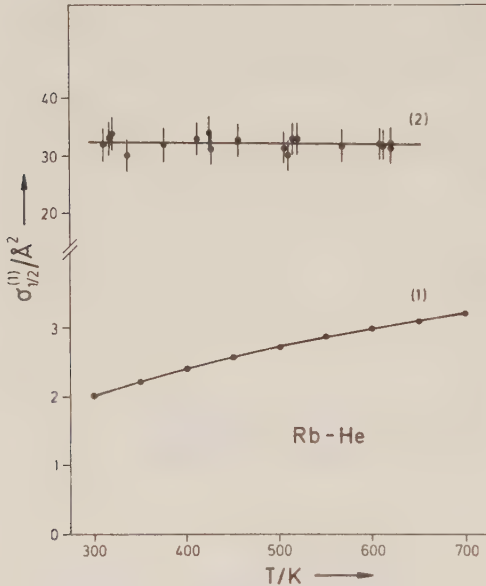


Abb.38: $\sigma_{12}^{(1)}$ als Funktion der Temperatur.
(2) gemessen
(1) theoretisch

3.2 Krypton und Xenon

Abb.39 zeigt $\sigma_{3/2}^{(1)}$ für Krypton und $\sigma_{3/2}^{(1)}$ und $\sigma_{3/2}^{(2)}$ für Xenon als Funktion der Temperatur. Wie im Fall von Helium gibt es auch hier die vorhergesagten fallenden Geraden. Die Gerade verläuft für Krypton etwas steiler als für Xenon in Übereinstimmung mit den Messungen von Faroux am Quecksilber /75/.

Um die in Kap. III 1.2.2 berechneten Werte von $\sigma_{1/2}^{(1)}$ mit den Messungen vergleichen zu können, wurde $v_r \cdot \sigma_{1/2}^{(1)}(w)$ mit einer Maxwellverteilung gemittelt und anschließend durch $\bar{v}_r$ dividiert. Abb.40 zeigt die Ergebnisse für Krypton und Xenon im Vergleich mit den Meßwerten. Im Fall von Krypton kann man sagen, daß eine befriedigende Übereinstimmung erreicht wird. Für Xenon sind die theoretischen Werte um etwa $5-7 \text{ \AA}^2$ größer

als die experimentellen, aber auch hier wird die Temperaturabhängigkeit richtig wiedergegeben.

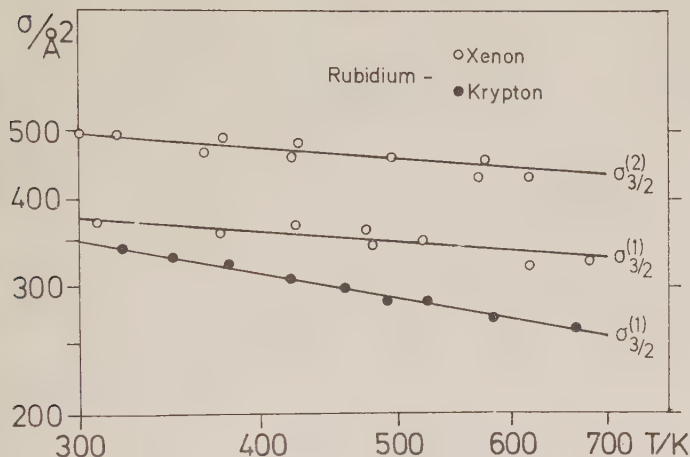


Abb. 39: $\sigma_{3/2}^{(1)}$ und $\sigma_{3/2}^{(2)}$ in Abhängigkeit von der Temperatur für Krypton und Xenon.

4. Zusammenfassung des III. Teils

Die Wirkungsquerschnitte $\sigma_{3/2}^{(1)}$, $\sigma_{3/2}^{(2)}$ und $\sigma_{1/2}^{(1)}$ wurden im Temperaturbereich $40^\circ\text{C} \rightarrow 450^\circ\text{C}$ für die Edelgase Helium, Krypton und Xenon gemessen. Die Ergebnisse für den $^2P_{3/2}^{(1)}$ -Zustand stimmen mit den theoretischen Vorhersagen überein. $\sigma_{1/2}^{(1)}$ wurde mit einer halbklassischen Theorie (klassische Bahn, quantenmechanische Behandlung der Elektronen - zustände) im Temperaturbereich $10\text{ K} \rightarrow 1000\text{ K}$ berechnet. Für Helium widersprechen sich Experiment und Theorie, während bei Krypton und Xenon die Berücksichtigung der Bahneffekte (Orbiting) bei der Rechnung zu einer guten Übereinstimmung mit den experimentellen Daten führt.

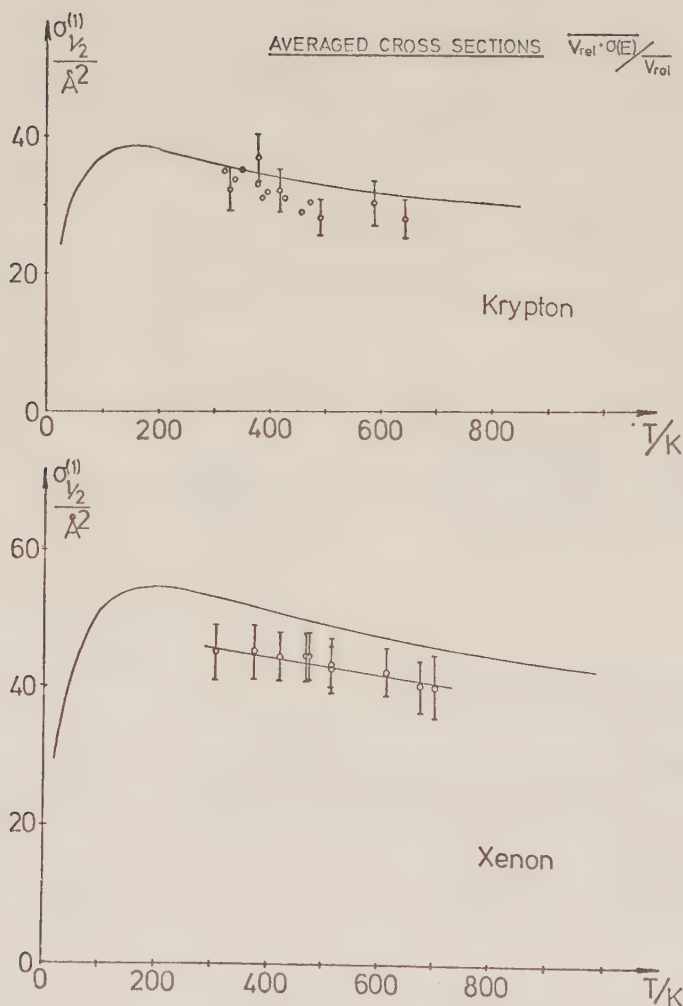


Abb. 40: $\sigma_{1/2}^{(1)}(T)$ berechnet — (Mittelung der Kurve $\sigma_{1/2}^{(1)}(\omega)$ aus Abb. 33 mit einer Maxwellverteilung) im Vergleich mit den Meßwerten $\circ \pm \circ$ für Krypton und Xenon

Teil IV. Ausblick; Messung bei niedrigen Temperaturen

Aus Abb.33 und Abb.40 erkennt man, daß Messungen von $\sigma_{1/2}^{(1)}$ für die schweren Edelgase bei tiefen Temperaturen (Bereich $40^\circ\text{C} \rightarrow -200^\circ\text{C}$) sehr interessant sein müßten. Es wurde auch für solche Messungen bereits eine Zelle konstruiert und fertiggestellt. Die Schwierigkeit besteht darin, daß bei den niedrigen Temperaturen auf Grund des zugehörigen kleinen Rubidium-Dampfdrucks das Signal unmessbar klein wird und von Streulicht (Reflexen) völlig überstrahlt wird. Man müßte also in der Zelle eine Rubidiumdichte erzeugen, die einer höheren Temperatur (mindestens etwa der von 0°C) entspricht, als es die Zellentemperatur ist. Deshalb wurde berechnet, wie der Temperaturverlauf und der Rb-Dichteverlauf in einer der Einfachheit halber als kugelsymmetrisch angenommen Zelle ist (Abb.41) mit dem Innenradius R_1 , dem Außenradius R_2 , mit den Temperaturen der inneren Kugel T_1 und der äußeren Kugel T_2 , $T_1 > T_2$. In der Zelle sollte sich ein Edelgas der Dichte n_0 (p ca. 1 Torr) befinden.

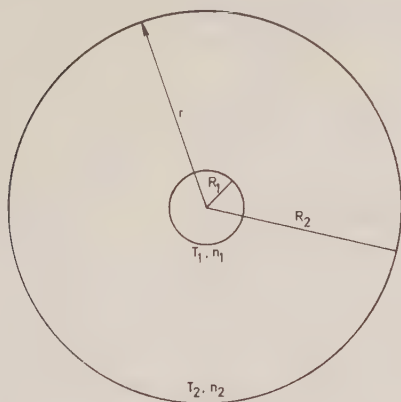


Abb.41: Kugelsymmetrische Zelle. Innenkugel Radius R_1 , Außenkugel Radius R_2

Die Wärmeleitgleichung im stationären Fall ($\frac{\partial T}{\partial t} = 0$) lautet:

$$\nabla \cdot (\Lambda \nabla T) = \nabla \Lambda \cdot \nabla T + \Lambda \Delta T = 0 \quad \Lambda = \text{Wärmeleitkoeffizient}$$

i.allg. ist $\Lambda = \Lambda(T)$. Für $R_2 - R_1 \gg$ mittlere freie Weglänge λ ($\approx 10^{-3}\text{cm}$) gilt:

$$\Lambda = C \cdot \sqrt{T}$$

Damit erhält man die Differentialgleichung

$$\frac{d\Lambda(T(r))}{dr} \cdot \frac{dT}{dr} + \Lambda(T(r)) \cdot \left(\frac{d^2T}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dT}{dr} \right) = 0$$

mit $\frac{d\Lambda}{dr} = \frac{1}{2} \cdot \frac{c}{\sqrt{T}} \cdot \frac{dT}{dr}$ und den Randbedingungen $T = T_1$ für $r = R_1$

und $T = T_2$ für $r = R_2$. Nach Umformen erhält man:

$$\frac{T''}{T'} + \frac{2}{r} + \frac{T'}{2T} = 0$$

Mit der Lösung $T(r) = (C_1/r + C_2)^{2/3}$.

Mit den Randbedingungen erhält man als Ergebnis:

$$T(r) = \left[\frac{T_1^{\frac{3}{2}} - T_2^{\frac{3}{2}}}{R_2 - R_1} \cdot R_2 \cdot \left(\frac{R_1}{r} - 1 \right) + T_1^{\frac{3}{2}} \right]$$

Abb.42 zeigt $T(r)$ in einer Zelle mit $2 \cdot R_2 = 10\text{cm}$, berechnet mit einem Fortran Programm.

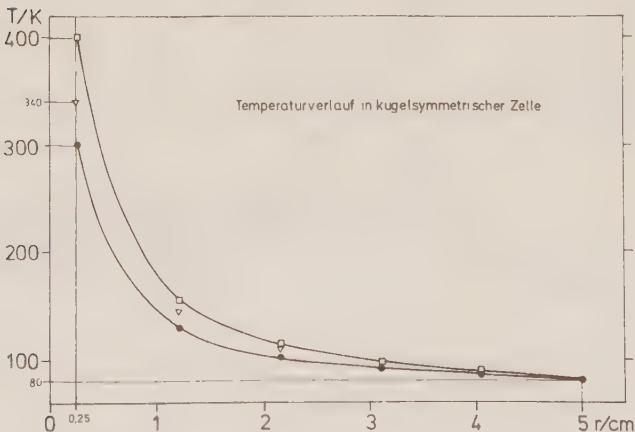


Abb.42: Temperaturverlauf in einer kugelsymmetrischen Zelle, gefüllt mit wenigen Torr Edelgas
 $R_1 = 0,25\text{ cm}$, $R_2 = 5\text{ cm}$

Bei den Randbedingungen $T_1 = 300 \rightarrow 400$ K und $T_2 = 80$ K, was sich experimentell noch verwirklichen lässt, hätte man im Beobachtungsraum (1 cm hinter der Zellwand) eine Temperatur von 87 K, die nicht sehr stark von T_1 abhängt.

Den Dichteverlauf bekommt man aus der Diffusionsgleichung:

$$\nabla \cdot (D \nabla n) = 0$$

also:

$$D \Delta n + \nabla D \cdot \nabla n = 0$$

Für konstanten Druck p gilt: $D = c T^{3/2}$; ($n_g = p/kT$)

Damit ist:

$$\frac{dD}{dr} = \frac{3}{2} \cdot c \cdot T^{\frac{1}{2}} \frac{dT}{dr}$$

Die Diffusionsgleichung bekommt damit die Form:

$$c \cdot T^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{d^2 n}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{dn}{dr} \right) + \frac{3}{2} \cdot c \cdot T^{\frac{1}{2}} \frac{dT}{dr} \cdot \frac{dn}{dr} = 0$$

Dies ist umformbar in die DGL:

$$\frac{n''}{n'} + \frac{2}{r} + \frac{3}{2} \frac{T'}{T} = 0$$

mit der Lösung:

$$n(T(r)) = B_2 + \frac{B_1}{C_1} \underbrace{\ln\left(\frac{C_1}{r} + C_2\right)}_{= \ln(T^{\frac{3}{2}})}$$

Mit den Randbedingungen $n = n_1$ für $r = R_1$ und $n = n_2$ für $r = R_2$ führt dies auf:

$$n(r) = n_2 + \frac{n_1 - n_2}{\ln T_1 - \ln T_2} \cdot (\ln T(r) - \ln T_2)$$

Für $n_2 \ll n_1$ gilt:

$$\frac{n(r)}{n_1} \approx 1 + \frac{\ln T(r) - \ln T_1}{\ln T_1 - \ln T_2}$$

Abb.43 zeigt $n(r)/n_1$ (berechnet mit einem Fortran Programm). Man sieht, daß im Beobachtungsraum die Rb-Dichte noch etwa 1/20 des Wertes an der warmen inneren Kugel ist. Da man diese recht warm machen kann, ohne die Zelle dabei außen nennenswert aufzuheizen, bestand die Hoffnung, ein genügend großes Signal erzeugen zu können.

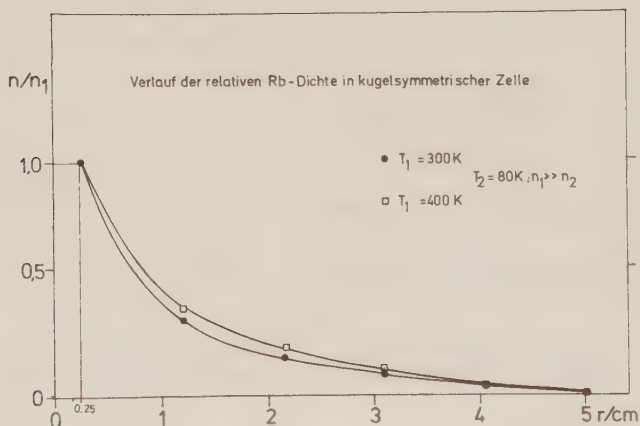


Abb.43: Rubidium-Dichte Verlauf in einer kugelsymmetrischen Zelle, bezogen auf die Dichte an der wärmeren Innenkugel

Aus dem Sattdampfdruck wurde nun noch die Verdampfungsgeschwindigkeit berechnet, um zu sehen, wie lange man mit einer Beladung der inneren Kugel von einigen Milligramm Rubidium messen kann.

Aus $j = n \cdot \bar{v} / 4$ und $n = p_{\text{dampf}}(T) / kT$ bekommt man für die Stromdichte:

$$j = \frac{p_{\text{dampf}} / \text{Torr}}{\sqrt{T / \text{K}}} \cdot 3,8 \cdot 10^{25} \frac{1}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$$

So kann man aus den Dampfdruckwerten und der Oberfläche der inneren Kugel die Stromstärke (= Teilchen/Sekunde) berechnen. Damit erhält man:

5mg Rb verdampfen bei	300 K	in	170 Stunden
	325 K	in	14,3 "
	350 K	in	1,8 "
	375 K	in	0,3 "

Mit einer solchen Zelle müßte man die Temperatur T_1 also zwischen 300 K und 325 K wählen, um Zeit für eine Messung zu haben. Man hätte dann Aussicht, ein meßbares Signal zu bekommen. Eine entsprechende Zelle wurde konstruiert und in der glastechnischen Werkstatt des Physikalischen Instituts der Universität Marburg hergestellt.

Messungen mit der beschriebenen Anordnung erschienen aber doch problematisch. Zunächst wird die Zellwand mit Rubidium beschlagen. Ein Versuch müßte zeigen, ob eine Messung trotzdem möglich ist. Man müßte wahrscheinlich die Zellwände zwischendurch immer wieder frei heizen. Auf jeden Fall dürften die Messungen sehr schwierig und zeitraubend sein. (Stabilität des Signals).

Gravierender noch ist die Ungenauigkeit der Temperaturmessung. Es war geplant, die Temperatur des Gases mit einem Thermoelement in unmittelbarer Nähe des Beobachtungsortes zu messen. Da das Thermoelement aber über seine Zuführungen von außen her immer etwas Wärme zugeführt bekommt, wird die Messung nie ganz korrekt sein. Andere Probleme mit Thermodraht in der Zelle (Belegen mit Rb, Unsauberkeit) wurden bereits bei den Hochtemperaturmessungen beobachtet und beschrieben.

Ein anderer Gedanke war, das Gas nicht stationär in der Zelle zu lassen und es dort über die Zellwände zu kühlen, sondern es vorgekühlt durch eine Zelle mit wärmeren Wänden diffundieren zu lassen. Das Problem des Beschlagens der Zellwände fiel dann weg, aber die Temperaturmessung würde noch kritischer.

Wesentlich eleganter ist die Methode, mit der in /9/ die Geschwindigkeitsabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte im Natrium - Edelgas Problem gemessen wurde. Bei dieser Methode werden mit Hilfe eines schmalbandigen Lasers nur solche Atome angeregt, die eine bestimmte Geschwindigkeitskomponente v_z entlang des Laserstrahls haben. "Scanned" man den Laser über das Dopplerprofil des absorbierenden Dampfes, so ändert man die Größe von v_z und kann damit - nach einigen mathematischen Umformungen - die Geschwindigkeitsabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte bestimmen. Leider steht ein geeigneter Laser für Messungen am Rubidium unserer Arbeitsgruppe nicht zur Verfügung.

Literaturverzeichnis

- /1/ Happer,W.: Rev. Mod. Phys. 44, 169, (1972)
- /2/ Nikitin,E.E.: "Theory of Nonadiabatic Collision Processes Including
Excited Alkali Atoms"
Erschienen bei: "The Excited State in Chemical Physics"
Edited by J.Wm.McGowan, published by J.Wiley and Sons, Inc.
(1975)
- /3/ Elbel,M.: Erscheint in Progress in Atomic Spectroscopy
- /4/ Gallagher,A.: Phys.Rev. 157, 24, (1967)
- /5/ Weber,E.W., Ackermann,H., Lauleinen,N.S., zu Putlitz,G.:
Z.Phys. 260, 341, (1973)
- /6/ Schneider,W.: Dissertation, Marburg, (1971)
- /7/ de Jong,B.: Diplomarbeit, Marburg, (1973)
- /8/ Gay,J.-C., Schneider,W.B.: Z.Phys.A, 278, 211, (1976)
- /9/ Apt,J., Pritchard,D.E.: Thesis, Mass. Inst. Techn., 1976
- /10/ Elbel,M., Schneider,W.: Z.Phys. 241, 244, (1971)
- /11/ Elbel,M.: Z.Phys. 248, 375, (1971)
- /12/ Elbel,M.: Annalen d. Phys. 22, 289, (1969)
- /13/ Masnou-Seeuws,F., McCarroll,R.: J.Phys.B 7, 2230, (1974)
- /14/ Gallagher,A.: Phys.Rev. 157, 68, (1966)
- /15/ Gallagher,A.: Phys.Rev. 172, 88, (1968)
- /16/ Zhitnikov,R.A., Kuleshov,P.P., Okunevich,A.I., Sevast'yanov,B.N.:
Sov.Phys.JETP 31, 445, (1970)
- /17/ Doebler,H., Kamke,B.: Z.Phys.A. 280, 117, (1977)
- /18/ Elbel,M., Kamke,B., Schneider,W., Physica 77, 137, (1974)
- /19/ Elbel,M., Hühnermann,H., Meier,Th., Schneider,W.B.:
Z.Phys.A 257, 339, (1975)
- /20/ Cuvellier,J., Fournier,P.R., Gounand,F., Pascale,J., Berlande,J.:
Phys.Rev.A 11, 846, (1975)
- /21/ Pitre,J., Krause,L.: Can.J.Phys. 45, 2671, (1967)
- /22/ Pimbert,M.: J.Physique 33, 331, (1972)
- /23/ Siara,I., Hryciushyn,E.S., Krause,L.: Can.J.Phys. 50, 1828, (1972)
- /24/ Gelbhaar, F.: Z.Phys.A, 272, 53, (1975)
- /25/ Fano,U.: Rev.Mod.Phys. 29, 74, (1957)
- /26/ Omont,A.: J.Physique 26, 26, (1965)
- /27/ Dyakonov,M.I., Perel,V.I.: Sov.Phys.JETP 21, 227, (1965)
- /28/ Berdowski,W., Shiner,T., Krause,L.: Phys.Rev.A 4, 984, (1971)
- /29/ Elbel,M., Koch,A., Schneider,W.: Z.Phys. 255, 14, (1972)
- /30/ Marrus,R., Yellin,J.: Phys.Rev. 141, 130, (1966)

- /31/ Papp,J.F., Franz,F.A.: Phys.Rev.A 5, 1763, (1972)
- /32/ Elbel,M., Schneider,W.: Physica 68, 146, (1973)
- /33/ Elbel,M., Schneider,W.: OPaLS Konferenz, Warsaw, Juni 1968
- /34/ Elbel,M.: Can.J.Phys. 48, 3047, (1970)
- /35/ Elbel,M.: Phys.Lett. 28 A, 4, (1968)
- /36/ Gordeyev,E.P., Nikitin,E.E., Ovchinnikova,M.Ya.:
Can.J.Phys. 47, 1819, (1969)
- /37/ Nikitin,E.E.: J.Chem.Phys. 43, 745, (1965)
- /38/ Elbel,M., Naumann,F.: Z.Phys. 204, 501, (1967)
- /39/ Kamke,B.: Z.Phys.A 273, 23, (1975)
- /40/ Lewis,E.L., McNamara,L.F.: Phys.Rev. A 5, 2643, (1972)
- /41/ Cooper,J.: Rev.Mod.Phys. 39, 167, (1967)
- /42/ Drummond,D.L., Gallagher,A.: J.Chem.Phys. 60, 3426, (1973)
- /43/ Nikitin,E.E.: Com.Atom.Mol.Phys. 3, 7, (1971)
- /44/ Suzor,A.: Thèse "Etude des collisions entre alcalin à grande structure
fine et Hélium; élargissement, déplacement et dépolariisation
des raies spectrales de l'alcalin". Paris 1973
- /45/ Roueff,E., Suzor,A.: J.Physique 35, 727, (1974)
- /46/ Masnou-Seuws,F., McCaroll G.: J.Phys.B 7, 2230, (1974)
- /47/ Nikitin,E.E.: J.Chem.Phys. 45, 2671, (1965)
- /48/ Kielkopf,J.F.: J.Chem.Phys. 61, 4733, (1974)
- /49/ Baylis,W.E.: J.chem.Phys. 51, 2665, (1969)
- /50/ Pascale,J., Vandeplanque,J.: J.Chem.Phys. 60, 2278, (1974)
- /51/ Franz,F.A., Shuey,R.T., Leutert,G.: Helv.Phys.Acta 40, 778, (1967)
- /52/ Brink,D.M., Satchler,G.R.: "Angular Momentum". Oxford Library of the
Physical Sciences, Clarendon Press, Oxford, 7. Auflage, 1968
- /53/ Grawert,G.: Z.Phys. 225, 283, (1969)
- /54/ Bulos,B.R., Happer,W.: Phys.Rev.A 4, 849, (1971)
- /55/ Franz,F.A., Franz,J.R.: Phys.Rev. 148, 82, (1966)
- /56/ Omont,A., Meunier,J.: Phys.Rev. 69, 92, (1968)
- /57/ Okunevich,A.I., Perel,V.I.: Sov.Phys.JETP 31, 356, (1970)
- /58/ Lewis,E.L.; Wheeler,L.S.: "Effect of Hyperfine Structure on the
Relaxation of Alkali Metal Resonance Levels". Im Druck
bei J.Phys.B
- /59/ Brewer,R.G.: Rev.Sc.Instr. 32, 1356, (1961)
- /60/ Kopfermann,H.: Kernmomente, 1956
- /61/ Williamson,J.H.: Can.J.Phys. 46, 1845, (1968)
- /62/ Kumar,L., Callaway,J.: Phys.Lett. 28 A, 385, (1968)
- /63/ Shimoni,Y., Wilson,A.D.: Chem.Phys. 11, 289, (1975)

- /64/ Roueff,E.: Private Mitteilung. Berechnet mit der Theorie aus /36/
und den Potentialen aus /50/. Der He-Wert in Klammern
in Tabelle 1 mit Potentialen aus /49/
- /65/ Dashevskaya,E.I.,Mochova,N.A.: Opt.a.Spectr. 33, 817, (1972)
- /66/ Mies,F.H.: Phys.Rev.A 7, 942, (1973)
- /67/ Schneider,W.B.: Z.Phys. 248, 387, (1971)
- /68/ Guisti - Suzor,A., Roueff,E.: J.Phys.B 8, 2708, (1975)
- /69/ Roueff,E.: J.Phys.B 8, L429, (1975)
- /70/ Lijnse,P.L.: J.Quant.Spectr.Rad.Transfer 14, 1195, (1974)
- /71/ Gayet, R.; Brouillaud,B.: Im Druck bei J.Phys.B
- /72/ Niewitecka,B., Krause,L.: Can.J.Phys. 51, 425, (1972)
- /73/ Goldhor,R., Pritchard,D.: J.Chem.Phys. 64, 1189, (1976)
- /74/ Lijnse,P.L.: Rev. of Lit. on Quenching, Excitation and Mixing
Collision Cross-Sections for the First Resonance
Doublets of the Alkalies.
Rep.398, Fysisch Laboratorium, Rijksuniversiteit
Utrecht, Netherlands, (1972)
- /75/ Faroux,J.P., Brossel,J.: C.R.Acad.Scr.(Paris) 261, 3092, (1965);
2633, 612, (1966); 2648, 1452, (1967);
262 B, 41, (1966); 262 B, 1385, (1966)
- /76/ Doeblar,H.: Staatsexamensarbeit, Marburg 1977

Herrn Prof. Dr. M. Elbel möchte ich danken für die Idee zu dieser Arbeit, für die Möglichkeit, sie in seiner Arbeitsgruppe durchzuführen und für sein förderndes Interesse und die klärenden Diskussionen im Verlauf der Arbeit.

Meinen Laborkollegen, Herrn Dr. W. Schneider, Herrn Dr. P. Geittner, Herrn K. Ohlenbusch, Herrn Dipl.Phys. W. Kamke, Herrn Dipl.Phys. W. Böck, Herrn B. Vettin, Herrn K. Nahrstedt und Herrn H. Doeblen danke ich für ihre Bereitschaft, über anstehende Probleme zu diskutieren und beim Experimentieren Hilfe zu leisten, wenn es nötig wurde. Unter ihnen möchte ich besonders Herrn H. Doeblen, der im Rahmen der Arbeit seine Staatsexamensarbeit anfertigte, für seine Mitwirkung bei den Temperatur - abhängigkeitsversuchen danken, und meinem Gatten Herrn W. Kamke für seine stete Hilfsbereitschaft vor allem in Problemen des Programmierens und für sein Verständnis, wenn wieder einmal die Nacht hindurch gemessen werden mußte.

Danken möchte ich auch dem Glasbläsermeister Herrn M. Beetz für das Interesse und die Sorgfalt, mit der er die Resonanzzellen anfertigte und für seine Bereitschaft, auch nach Feierabend noch einzuspringen, wenn es nötig war.

Lebenslauf

Am 2. Dezember 1949 wurde ich, Annette Barbara Kamke, geb. de Jong, als Tochter des Dipl. Ing. für Maschinenbau Karl Heinz de Jong und seiner Ehefrau Dr. Ing. Brigitte de Jong, geb. Schaefers, in West - Berlin geboren.

Von 1956 bis 1960 besuchte ich die Schulz Briesen Volksschule in Gelsenkirchen. Von 1960 bis 1968 besuchte ich das städtische neusprachliche Mädchengymnasium in Wattenscheid, wo ich am 7. Juni 1968 die Reifeprüfung ablegte.

Im Wintersemester 1968/69 begann ich mit dem Studium der Physik an der Ruhr Universität Bochum mit dem Ziel, das Diplom in diesem Fach zu erwerben. Am 13. Oktober 1970 legte ich in Bochum die Diplom - Vorprüfung ab. Nach einem weiteren Semester in Bochum setzte ich das Studium der Physik an der Philipps Universität Marburg fort, wo ich am 16. Juli 1973 die Diplom - Hauptprüfung ablegte.

Anschließend begann ich im August 1973 mit der vorliegenden Dissertation am Physikalischen Institut der Philipps Universität Marburg.

Am 28. September 1973 heiratete ich Herrn Dipl. Phys. Wolfgang Kamke. Am 7. Mai 1976 wurde meine Tochter Stefanie geboren.

Meine Hochschullehrer waren die Herren Professoren

(in Bochum in Physik)

Kamke, Giese, von Buttler, Schlumbohm, Kneller, Kröll, Kummel

(in Bochum in Mathematik als Pflichtnebenfach)

Sommer, Schmitt, Ewald, Ehlich, Haußmann, Mohn

(in Bochum in Chemie als Pflichtnebenfach)

Specker, Bergmann

(in Marburg in Physik)

Elbel, Walcher, Cappeller, Wolter, Stuke, Großmann, Kerler, Ludwig

(in Marburg in Kernchemie als Wahlpflichtfach)

Starke, Brandt

